

Spinfüggő szórási folyamatok kétdimenziós elektronrendszerekben

Doktori értekezés

Pályi András

Eötvös Loránd Tudományegyetem, Természettudományi Kar
Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

Témavezető: Dr. Cserti József, kandidátus, egyetemi docens

ELTE TTK, Fizika Doktori Iskola

Anyagtudomány és Szilárdtestfizika Program

Iskolavezető: Dr. Horváth Zalán, az MTA rendes tagja, tanszékvezető egyetemi tanár

Programvezető: Dr. Lendvai János, tanszékvezető egyetemi tanár

Budapest

2008

Köszönetnyilvánítás

Köszönettel tartozom mindenekelőtt témavezetőmnek, Cserti Józsefnek, amiért az elmúlt években mindvégig türelmesen, készségesen és érdeklődve irányította munkámat. Hálás vagyok az eredményes együttműködésért a dolgozathoz kapcsolódó publikációim további társszerőinek, Csordás Andrásnak, Péterfalvi Csabának és Ulrich Zülickének. Péterfalvi Csabát külön köszönet illeti a dolgozat megírásához nyújtott gyakorlati segítségért. Köszönettel tartozom a hasznos szakmai beszélgetésekért Béri Benjáminnak, Mike Fearnnek, George Giavarasnak, John Jeffersonnak és Colin Lambertnek. Hálás vagyok családomnak, amiért a nyugodt háttér megteremtésével hozzájárultak a dolgozat létrejöttéhez.

Tartalomjegyzék

Köszönetnyilvánítás	2
1. Bevezetés	7
1.1. Kétdimenziós elektronrendszerek	8
1.2. Spin-pálya-kölcsönhatás	9
1.3. Grafén	15
1.4. A dolgozat felépítése	18
2. Anomális Mott-szórás kétdimenziós elektrongázban	19
2.1. Bevezetés	20
2.2. Az S -mátrix formalizmus	20
2.2.1. Homogén rendszer	20
2.2.2. Az S -mátrix	21
2.2.3. Sűrűségmátrix-formalizmus	23
2.2.4. Hatáskeresztmetszet	24
2.2.5. Polarizáció	27
2.3. A modell	28
2.4. Szimmetriák analízise	30
2.4.1. Spinbillentő visszaszórás	32
2.4.2. Ferde szórás	32
2.4.3. Polarizáció	33
2.4.4. Anomális Mott-szórás	34
2.5. Born-közelítés	35
2.6. Lokális Rasba-kölcsönhatás	38
2.6.1. Eredmények	41
2.7. Összefoglalás	42

3. Potenciálszórás Rasba-elektromágnesben	45
3.1. Bevezetés	46
3.2. Az S -mátrix formalizmus	46
3.2.1. Homogén rendszer	46
3.2.2. Az S -mátrix	49
3.2.3. Sűrűségmátrix-formalizmus	50
3.2.4. Hatáskeresztmetszet	52
3.2.5. Polarizáció	54
3.3. Szimmetriák analízise	55
3.3.1. Spinbillentő visszaszórás	56
3.3.2. Ferde szórás	56
3.3.3. Polarizáció	58
3.4. Born-közelítés	58
3.5. Szennyezők „merev fal” modellje	60
3.6. Spin-dipólusok szennyezők körül	61
3.6.1. Az eredő spinsűrűség szimmetriatulajdonságai	63
3.6.2. Aszimptotikus viselkedés	64
3.6.3. A spin-dipólus aszimptotikus alakja	66
3.6.4. Diskusszió	67
3.7. Összefoglalás	69
4. Kausztikák grafén n-p átmenetben	71
4.1. Bevezetés	72
4.2. Kvantummechanikai tárgyalás	73
4.3. Optikai analógia	76
4.4. Kausztikák	78
4.5. Diskusszió	81
4.6. Összefoglalás	83
5. Függelék	85
5.1. Spinbillentő visszaszórás: a T -mátrix formalizmus	86
Irodalomjegyzék	88

1. fejezet

Bevezetés

1.1. Kétdimenziós elektronrendszerek

A szilárdtestfizika szóhasználatára szerint kétdimenziós elektrongáznak (2DEG-nek) hívjuk azokat az elektronrendszereket, amelyekben a részecskék két térbeli irányban szabadon mozoghatnak, de a harmadik dimenzióban mozgásuk csupán egy kis térrészre korlátozott [1]. Ez a térbeli korlátozás kvantált energiaszintekhez vezet, míg a másik két dimenzióban a mozgás jellemezhető az elektronok hullámszámvektorával. Ezek a rendszerek tehát nem kétdimenziósak a szó szerinti értelemben, hiszen a hullámfüggvények kiterjedése a harmadik dimenzióban is véges.

Félvezető anyagokban 2DEG kétféleképpen is létrehozható [2]. Egyszerű p - n heteroátmenetekben (pl. GaAs-AlGaAs) megfelelő adalékolás esetén a határfelületnek a p tartomány felé eső oldalán kialakulhat egy potenciálvölgy a kémiai potenciál alatt, és ilyenkor a völgyben összegyűlő elektronok a határfelület mentén 2DEG-et alkotnak. Ez az ún. inverziós réteg. A másik módszer szerint két, szélesebb tiltott sávú félvezető réteg közé szendvicsszerűen egy keskenyebb tiltott sávú félvezető réteget kell növesztetni (pl. AlGaAs-GaAs-AlGaAs). Ilyenkor a középső réteg képez potenciálvölgyet a vezetési elektronok számára. Ezeket a kettős heteroátmeneteket kvantumgödöröknek (quantum well) nevezik. Egy indium-antimonid (InSb) kvantumgödör sématisz rajza látható az 1.1. ábrán. Mivel az InSb vezetési sávja alacsonyabban fekszik, mint az InAlSb ötvözeté, ezért ebben a rendszerben a vezetési elektronok mozgása az InSb tartományra korlátozódik.

A félvezetőkben létrehozott 2DEG-nek számos előnyös tulajdonsága van. Egyrészt, ebben a rendszerben az elektronok mozgékonyasága jóval meghaladhatja a tömbi anyagra jellemző értéket, ami a gyors áramköri elemek ipari fejlesztése szempontjából is lényeges. Az 1.1. ábráról jól látszik, hogy az elektrongáz nagy mozgékonyasága annak köszönhető, hogy az adalékolás csak egy vékony, az elektrongáztól térben elválasztott tartományban történik, tehát a donortatomokon való szóródás kevésbé jelentős, mint egy homogén módon adalékolt tömbi mintában. Egy másik fontos tulajdonság, hogy a 2DEG felületi elektronsűrűsége hangolható a heteroszerkezet tetejére növesztett fém kapuelektroda feszültségének változtatásával. Megfelelő mintázattal kapuelektrodák alkalmazásával a 2DEG elektronjainak mozgása tovább korlátozható, így akár kvázi-egydimenziós kvantum drótok vagy kvázi-nulladimenziós kvantum dotok tulajdonságai is vizsgálhatók [3, 4].

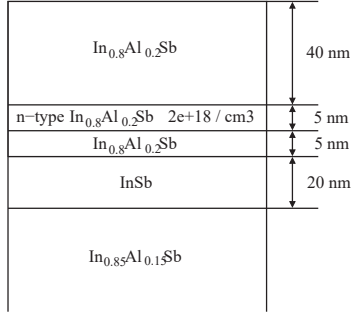
Ezek a félvezető heteroszerkezetek bizonyos esetekben hatékonyan modellezhetők az ún. burkolófüggvény-közelítéssel (EFA, envelope function approximation) módszerével [5]. Az EFA módot ad arra, hogy az elektromágneses terek hatása alatt lévő félvezető

elektronállapotait egy olyan effektív Schrödinger-egyenleten keresztül vizsgáljuk, amelyben a kristályrács ionjainak periodikus potenciálja már nem szerepel. Az EFA-modellek konstrukciója többnyire szimmetriamegfontolásokon alapul, ezért az eredményként kapott, általában többkomponensű effektív Hamilton-operátor tartalmaz ismeretlen paramétereket. Ezeket az ismeretlen paramétereket aztán vagy kísérleti eredményekhez illesztve, vagy pontosabb sávszerkezet-számítási módszerek felhasználásával lehet meghatározni.

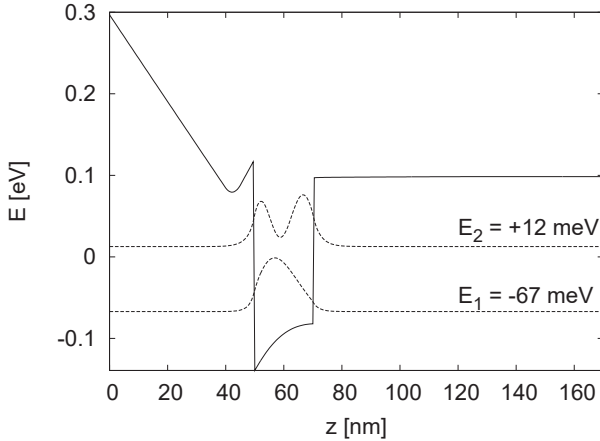
A keskeny tiltott sávú III-V félvezetőkre jól működő Kane-modell [5,6] egy olyan speciális EFA-modell, ahol az effektív Schrödinger-egyenletben szereplő hullámfüggvény nyolckomponensű, ez a modell ugyanis leírja a vezetési sáv és a nehéz, könnyű és split-off valenciasávok elektronállapotait, a köztük levő csatolásokat, és figyelembe veszi az elektron feles spinű fermion jellegét is. A Kane-modell figyelembe veszi továbbá a rácsatomok spin-pálya potenciálját, és emiatt számot ad a valenciasáv spin-pálya-felhasadásáról is. Ennek a modellnek egy tovább finomított változatát [7] használva numerikusan meghatároztuk az 1.1. ábrán szereplő kettős heteroátmenet sávszerekezetét, ezt mutatjuk be az 1.2. ábrán. A számítás során az elektron-elektron kölcsönhatást a Hartree-közelítésben vettük figyelembe, az eredményeket tehát egy csatolt Schrödinger-Poisson egyenletrendszer iteratív megoldásával kaptuk meg. Az 1.2. ábrán a folytonos vonal mutatja a vezetési sáv energiaminimumát mint a heteroszerkezet tetejétől mért távolság függvényét. Ez a helyfüggés a különböző kompozíciójú rétegek eltérő sávszerkezetéből adódó lépcsőfüggvényszerű járuléknak és a tértöltés által indukált elektrosztatikus tér folytonos potenciáljának összegeként adódik. Ebben a kvantumgödörben a vezetési sávban két kötött állapot alakul ki, az ezekhez tartozó hullámfüggvények abszolútérték-négyzetét jelölik a szaggatott vonalak. A hullámfüggvények alapvonalai jelzik a vonatkozó energiasajátértékeket a Fermi-energiához, mint referenciaponthoz viszonyítva. Látható, hogy a két kvantált energiaérték különbsége 0.1 eV nagyságrendű. Ez azt jelenti, hogy akár szobahőmérsékleten is létrehozható olyan 2DEG, amelyben csak a legalsó alsáv betöltött, hiszen $T = 300$ K esetén a Fermi-Dirac-eloszlás termikus kiszélesedése csupán ~ 26 meV.

1.2. Spin-pálya-kölcsönhatás

A spin-pálya kölcsönhatás legismertebb következménye az atomháj energiaspektrumának finomszerkezete [8]. Persze az atommag által keltett spin-pálya kölcsönhatás nem csak kötött, de szabad elektronokra is hat. Ismert, hogy ha szabad elektronok atomi spin-pálya-potenciálon szóródnak – ez az ún. Mott-szórás –, akkor a szórást leíró mennyiségek függenek a beeső elektron spinpolarizáció-vektorától [9]. Az ilyen spinfüggő mennyiségek egyike



1.1. ábra. InSb kvantumgödör vázlata. Az n -típusú rétegben a donorkoncentráció $n_d = 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.



1.2. ábra. InSb kvantumgödör (ld. 1.1. ábra) vezetési sávjának minimuma a heteroszerkezet tetejétől mért távolság függvényében (folytonos vonal), a kötött állapotok hullámfüggvényeinek abszolútérték-négyzete (szaggatott vonalak), és a hozzájuk tartozó energiaértékek. A Fermi energia egybeesik az $E = 0$ egyenessel.

a differenciális szórási hatáskeresztmetszet: a Mott-szórás jellemzője, hogy egy kiszemelt szórási síkban a differenciális hatáskeresztmetszet általában nem szimmetrikus az előreszórás irányára nézve, és az aszimmetria a beeső elektronnyaláb polarizációvektorának a síkra merőleges komponensével arányos. Ez az ún. „ferde szórás” effektus annak ellenére létrejön, hogy az atommag által keltett potenciál gömbszimmetrikus. A spinfüggő szórási folyamatokkal kapcsolatos másik lényeges mennyiség a szórt nyaláb polarizációvektora a szórócentrumtól távol, vagy más néven az aszimptotikus polarizáció. Ismert, hogy a Mott-féle szórási folyamatban egy teljesen polarizálatlan beeső elektronnyaláb esetén a szórt nyaláb általában már nem polarizálatlan, és a szórt nyaláb aszimptotikus polarizációja mindig merőleges a szórási síkra. Elméleti szempontból lényeges eredmény, hogy a fenti két effektus, a ferde szórás és szórócentrum polarizáló tulajdonsága az első Born-közelítésben nem jelenik meg.

A spin-pálya-csatolás nem kötődik szigorúan atommagok jelenlétéhez. A Dirac-egyenlet gyengén relativisztikus esetre vonatkozó sorfejtéséből adódik, hogy egy tetszőleges V elektrosztatikus potenciál hatására a vákuumbeli elektronok Pauli-egyenletének Hamilton-operátorában megjelenik egy

$$H_{\text{SO,vac}} = \frac{\lambda_{\text{vac}}}{\hbar} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} \times \nabla V) \quad (1.1)$$

alakú tag, ahol $\lambda_{\text{vac}} = -\hbar^2/(4m_0^2c^2) \approx -3.7 \times 10^{-6} \text{ \AA}^2$, és m_0 az elektrontömeget, c pedig a fénysebességet jelöli. $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ az impulzus operátora, $\hbar\boldsymbol{\sigma}/2 = \hbar(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)/2$ az elektronspin operátora, tehát $\sigma_{x,y,z}$ a Pauli-mátrixokat jelöli:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.2)$$

A félvezetők modellezése kapcsán már említett Kane modell 8×8 -as effektív Hamilton-operátorából perturbációs számítással levezethető egy olyan 2×2 -es effektív Hamilton-operátor, ami csak a vezetési sáv elektronjait írja le [5, 10–12]. Egy tetszőleges V elektrosztatikus potenciál hatása ebben az effektív Hamilton-operátorban ugyanolyan alakban jelenik meg, mint a vákuumbeli (1.1) Hamilton-operátor esetében. Az egyetlen lényeges különbség, hogy félvezetőben a spin-pálya-csatolás λ együtthatója

$$\lambda \approx \frac{P^2}{3} \left[\frac{1}{E_0^2} - \frac{1}{(E_0 + \Delta_0)^2} \right], \quad (1.3)$$

ahol a P , E_0 és Δ_0 az anyagra jellemző paraméterek: P a Kane-féle momentum-mátrixelem, E_0 a tiltott sáv szélessége és Δ_0 az ún. spin-pálya mátrixelem, ami éppen a tiltott sáv aljának és a split-off sáv maximumának távolsága. [12] és [13] alapján a λ paraméter nagyságrendje GaAs-ben $\sim 1 \text{ \AA}^2$, InAs-ben $\sim 10 \text{ \AA}^2$ és InSb-ban $\sim 100 \text{ \AA}^2$. Az (1.3) kifejezés következménye, hogy a λ paraméter annál nagyobb, minél keskenyebb az E_0 tiltott sáv és minél nagyobb a Δ_0 spin-pálya mátrixelem. A vákuumra érvényes λ_{vac} és a félvezetőkre jellemző λ értékek összevetése alapján világos, hogy a félvezetőkben mozgó elektronra ható spin-pálya-kölcsönhatás nagyságrendekkel erősebb effektusokhoz vezethet, mint vákuumbeli megfelelője.

Láttuk tehát, hogy bizonyos szilárdtestek esetében a kristályrácsban ülő töltött szennyezők által keltett spin-pálya-csatolás ugyanazzal a Schrödinger-egyenlettel írható le, mint a vákuumbeli esetben. Éppen ezért a vezetési elektronok szennyezőkön való szóródása is pontosan a Mott-szórás tulajdonságait mutatja: a szilárdtestben is megjelenik a ferde szórás jelensége és a szórócentrum polarizátorként való működése. Ennek a ténynek egyik mérhető következménye az anomális Hall effektus: ferromágneses anyagokban a Hall-ellenállás zérus mágneses térben is lehet véges. Ezekben az anyagokban ugyanis zérus mágneses térben is véges az elektronok kollektív spinsűrűsége, így ha a rendszeren áram folyik át, akkor a szennyezőkön való ferde szórás miatt az áram irányára merőlegesen töltésfelhalmozódás történik [14–16]. Az anomális Hall effektussal rokon jelenség az spin Hall effektus: paramágneses anyagokban az elektronok kollektív polarizációja zérus, viszont a spinfüggő szórócentrumok a Mott-szórás során polarizátorként működnek, mégpedig úgy, hogy a balra szórt elektronok és a jobbra szórt elektronok ellentétes irányú polarizációra tesznek szert (ld. a 2.4.4. szakaszt). Ezért ha a rendszeren áram folyik át, akkor a szennyezők körüli spin-pálya-csatolás következményeképpen az áram irányára merőlegesen spinfelhalmozódás történik [12, 17–20]. (Megjegyezzük, hogy mind az anomális Hall effektus, mind pedig a spin Hall effektus létrehozásában más mechanizmusok is lényeges szerepet játszhatnak.)

A háromdimenziós anyagokban tehát a szennyezők körüli spin-pálya-csatolás okozta spinfüggő szórási folyamatok a Mott-szórás tulajdonságait mutatják. Mivel napjainkban számos szilárdtestfizikai mérést kétdimenziós elektronrendszerekben hajtanak végre, joggal merül fel a kérdés: milyen tulajdonságok jellemzik a spinfüggő szórási folyamatokat, ha a vezetési elektronok mozgása egy kétdimenziós tartományra korlátozódik, azaz az elektron a szennyező háromdimenziós potenciálterének csupán egy kétdimenziós metszetét éri? A kérdés kiterjeszthető, ha figyelembe vesszük, hogy ezek a 2DEG-et magukba foglaló réteges struktúrák általában nem szimmetrikusak az elektrongáz síkjára (ld. 1.1. ábra), ami miatt az elektronokra egy homogén módon jelen lévő, a szennyezőktől független spin-pálya

kölcsönhatás, az ún. Rasba-féle spin-pálya kölcsönhatás is hat. A Kane-modellből a Brillouin-zóna centrumának közelében érvényes perturbatív eljárással levezethető [10, 11], hogy az ilyen aszimmetrikus heterostruktúrákban kialakuló 2DEG effektív kétdimenziós Hamilton-operátorában a szokásos kinetikus energiának megfelelő tag mellett megjelenik az ún. Rasba-féle spin-pálya kölcsönhatási tag is [21]:

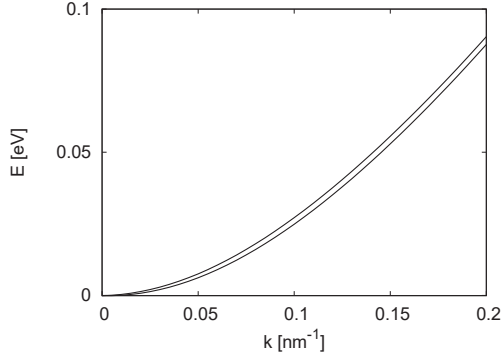
$$H_R = \frac{\alpha}{\hbar}(\sigma_x p_y - \sigma_y p_x). \quad (1.4)$$

Az α paraméter a félvezető szerkezet jellemzőitől függ. A Rasba-tag megjelenésének, azaz a 2DEG-et tartalmazó heteroszerkezet inverziós aszimmetriájának közvetlen következménye, hogy homogén 2DEG-ban a véges hullámszámvektorokra a diszperziós reláció felhasad,

$$E_{\pm}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \alpha k. \quad (1.5)$$

Egy adott rendszerben az (1.4) Rasba-tag erősségét jellemző α paraméter vagy egy realisztikusabb modellből, vagy mérési eredményekből határozható meg. Az 1.1. ábrán bemutatott InAlSb/InSb kvantumgödör esetére elvégzett önkonzisztens számítás eredményét mutatjuk be az 1.3. ábrán. Az ábrán a legalsó vezetési alsáv diszperziós relációját ábrázoltuk a síkbeli hullámszámvektor abszolútértékének függvényében. A heteroszerkezet inverziós aszimmetriájából adódó spin-pálya-felhasadás jól látható. A diszperziós relációk a Brillouin-zóna centrumának közelében, esetünkben körülbelül a $k < 0.05 \text{ nm}^{-1}$ tartományban valóban jól követik az (1.5) képletet az $\alpha = 3 \times 10^{-11} \text{ eV m}$ választással.

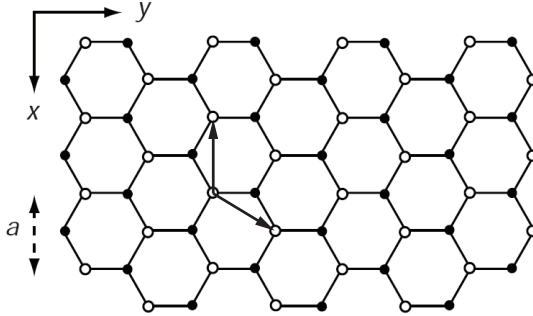
A szerkezeti inverziós aszimmetria okozta spin-felhasadásnak mérhető konzekvenciái vannak, és ezek módot adnak a felhasadást jellemző α mérésére. A Rasba-effektussal kapcsolatban a legáltalánosabb kísérlet a Subnyikov-de Haas-féle vezetőképesség-oszcillációk [2] vizsgálata. Ezekben a mérésekben [22–26] a vezetőképesség oszcillációi a 2DEG-re merőleges homogén mágneses tér erősségének függvényében lebegési jelenséget mutatnak. Az effektus az (1.4) kétdimenziós Rasba-moddal is megmagyarázható, így ezen kísérletek alapján α közvetlenül meghatározható. A mérések alapján bizonyítást nyert, hogy az α paraméter hangolható a heterostruktúra tetejére helyezett kapuelektroda feszültségének változtatásával [24–26]. A Rasba-effektus megjelenését és szabályozhatóságát igazolták a mezoszkopikus spin-interferométereken végrehajtott kísérletek is [27, 28]. A heteroszerkezet inverziós aszimmetriájából származó Rasba-effektus erősségének és a tömbi félvezető kristályszerkezetének aszimmetriájából adódó Dresselhaus-effektus [29] erősségének aránya az ún. spin-galvanikus



1.3. ábra. Az 1.1. ábrán bemutatott kvantumgödör legalsó vezetési alsávjának diszperziós relációja. A felhasadás annak a következménye, hogy a heteroszerkezet aszimmetrikus a 2DEG síkjára. Az energiatengely referenciapontja a $k = 0$ hullámszámhoz tartozó kétszeresen degenerált energiaszint.

effektust [30] kihasználva mérhető [31]. A 2DEG-ra merőleges mágneses térben elvégzett elektronspin-rezonancia kísérletek [32] szerint az 1.1. ábrán mutatott kvantumgödörhöz hasonló InSb mintában $\alpha \sim 10^{-11}$ eV m, ami nagyságrendileg egyezik numerikus számításaink eredményével.

A szakirodalom általában „spintronika” néven említi a szilárdtestfizika azon területét, amely az elektronspin manipulálásának lehetőségét vizsgálja [33]. A spintronika egyik alapvető kérdése, hogy hogyan lehet félvezetőben mágneses terek és optikai módszerek nélkül, csupán elektromos terek használatával spinpolarizált elektroneloszlást létrehozni. A tisztán elektronikus úton létrehozott spinpolarizált elektronnyaláb ugyanis módot adna arra, hogy a jövőbeli spintronikai eszközök a már meglévő félvezető-technológiára épülve valósuljanak meg. Éppen ezért ez egy intenzíven kutatott terület, a javaslatok közül csak néhányat említünk meg: az elméleti eredmények szerint ilyen elektronnyaláb létrehozható speciális, mágneses teret nem használó Stern-Gerlach-elrendezéssel [34], rezonáns alagútdiódával [35], csatolt kvantumdrót-pár segítségével [36], három terminállal rendelkező kvantumgyűrű-interferométerrel [37] vagy az optikából ismert kettőtörő és polarizáló plánparalel lemez elektron-optikai megfelelőjével [38].

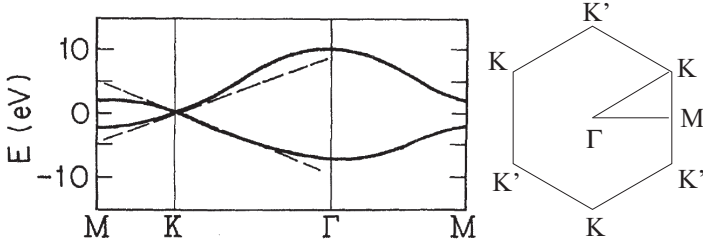


1.4. ábra. Szénatomok hatszögrácsa grafénben. A rácsra rajzolt két nyíl jelzi az elemi rácsvektorok egy lehetséges megválasztását. [44]

1.3. Grafén

A kétdimenziós elektronrendszerek egy speciális típusa valósul meg az egyrétegű grafitban, azaz szénatomok kétdimenziós hatszögrácsában. Ezzel az anyaggal – a grafénnel – kapcsolatban az első kísérleti eredményeket csak a közelmúltban publikálták [39–41], ennek ellenére felfedezése óta máris jelentős mennyiségű kutatási eredmény halmozódott fel, és elkészült néhány összefoglaló, áttekintő jellegű írás is [42–44]. Persze a grafén mint modell-rendszer már korábban sem volt ismeretlen a kondenzált anyagok elméletében: a szén-nanocsövek és a tömbi grafit leírásának évtizedek óta alapvető segédeszköze. A grafén elektronrendszere lényegesen különböző tulajdonságokat mutat, mint a konvencionális 2DEG-ek. Az elektronok viselkedését leíró modellek ismertetése után erre mutatunk példát.

A grafén hatszögrács-szerkezetét mutatja a 1.4. ábra. A szomszédos atomok közötti távolság mintegy 1.4 \AA , az a rácsállandó pedig ennek $\sqrt{3}$ -szorosa [45]. A szénatom négy vegyérték-elektronja közül három sp^2 -hibridizációval kovalens kötést létesít a szomszédos három atommal, a negyedik, p_z szimmetriájú állapot pedig kialakítja a valenciásávot. A sáv kialakulásának egyik modellje a szoros kötésű közelítés [2]. Mivel az elemi cellában két nem-ekvivalens atom található (fehér és fekete körök az 1.4. ábrán), ezért a szoros kötésű formalizmusban a hullámfüggvény – a spin szabadsági fok figyelembevétele nélkül – kétkomponensű lesz [46]. A szoros kötésű közelítés eredményeként kapott sávszerkezet [46, 47] látható az 1.5.



1.5. ábra. Balra: grafén elektronjainak diszperziós relációja szoros kötési közelítésben [47]. Az energia-tengely referenciapontja a Fermi-energia. Jobbra: a Brillouin-zóna és nevezetes pontjai.

ábrán. A sávszerkezet értelmezése céljából ugyanitt ábrázoltuk a reciprokrács Brillouin-zónáját és annak magas szimmetriájú pontjait. Az ábrán három helyen is megjelenő K pontok közül csak az egyik eleme a Brillouin-zónának, hiszen a másik kettő az egyikből egy-egy reciprokrácsvektorral való eltolással megkapható. Hasonlót állíthatunk a három K' pont esetén is. A K és K' pontok között viszont nem egy reciprokrácsvektor a különbség, tehát a Brillouin-zóna ezen két pontja nem ekvivalens.

Az 1.5. ábráról látszik, hogy a grafén olyan félvezető, melynek vezetési- és valenciasávja a Brillouin-zóna K és K' pontjaiban érintkezik. A diszperziós reláció ábráján ugyan a K' pont nem szerepel, de a Brillouin-zóna szimmetriáiból következik, hogy a sávok a K' pontban is érintik egymást. A tiltott sáv teljes hiányának köszönhetően a félvezető grafit-sík könnyen fémessé válhat: a grafén és a ráhelyezett fém kapoelektroda közé kapcsolt feszültség változtatásával kelteni lehet akár p , akár n típusú töltéshordozókat [40, 41]. Sőt, az elektrodák alakjának megfelelő megválasztásával tetszőleges alakú n - p átmenetek is létrehozhatók [48–51].

Ismeretes, hogy az elektromos transzport szempontjából érdekes folyamatok általában a Fermi-szint körüli energiatartományban játszódnak le. Ezeknek a folyamatoknak az elméleti vizsgálata szempontjából célszerű egy kontinuum (nem szoros kötésű) effektív Hamilton-operátor használata a K és a K' pontok körüli hullámszámtartományban. A kontinuum-elmélet hullámfüggvénye négykomponensű lesz, hiszen a grafén elemi cellájában két atom található, és külön hullámfüggvény írja le a K illetve a K' körüli állapotokat. A tetszőleges elektromágneses térbe helyezett grafént leíró 4×4 -es effektív Hamilton-operátor a szoros

kötésű közelítésből kiindulva az EFA módszert használva származtatható [46]. Általában a K és K' körüli állapotokat az elektromágneses tér összecsatolja, ha azonban az azt meghatározó ϕ és \mathbf{A} skalár- és vektorpotenciál térben elég lassan változik a rácsállandóhoz képest, akkor a Hamilton-operátor szétesik két, unitér transzformáció erejéig ekvivalens 2×2 -es blokkra [46]:

$$H_0 = c\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) + V, \quad (1.6)$$

ahol $c \approx 10^6$ m/s, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$, $\mathbf{p} = -i\hbar(\partial_x, \partial_y)$, $V = -e\phi$ és e az elemi töltés. Ebben az effektív Hamilton-operátorban a belső szabadsági fok az elemi cella két atomjára vonatkozik, és az elektronspinhez való hasonlóság okán az irodalomban ezt a szabadsági fokot általában pszeudospinnek nevezik. Homogén rendszer esetén, azaz amikor V és \mathbf{A} zérus, a H_0 síkhullám-sajátfüggvényei által definiált diszperziós reláció lineáris. Ezt mutatják a szagatott vonalak az 1.5. ábrán. Az ábráról kiderül az is, hogy a diszperziós reláció lineáris közelítése a Fermi-energia körüli néhány tized elektronvoltos energiatartományban érvényes. Ez persze meghatározza az (1.6) effektív Hamilton-operátor érvényességének határait is.

A fenti H_0 Hamilton-operátorral definiált Schrödinger-egyenlet jól használható modellnek bizonyult a grafénre jellemző rendhagyó kísérleti eredmények leírása során. Példaként említjük, hogy a grafén töltéshordozói a konvencionális 2DEG-ban mérttől lényegesen eltérő kvantum Hall effektust produkálnak. A jellegzetes platók a σ_{xy} Hall-vezetőképességben ugyanis grafén esetén nem a vezetőképesség-kvantum (e^2/h) egész számú, hanem annak félegész számú többszöröseinél jelennek meg [40, 41]. A jelenség értelmezhető az (1.6) Hamilton-operátor segítségével. Megmutatható ugyanis, hogy a vezetési- és valenciásávban kialakuló, azonos degenerációfokú Landau-szintek mellett az $E = 0$ energiasajátértékhez is tartozik mindkét sávban egy-egy nívó, és ezek degenerációfoka éppen fele a többi nívó degenerációfokának [52].

A hagyományos félvezető-fizikában az alkalmazások szempontjából is lényeges az n - p átmenetek vizsgálata [2]. Az adalékolt félvezetőkben a donor- és akceptoratomok által keltett rendezetlenség miatt a töltéshordozók viselkedése többnyire félklasszikus módszerekkel vizsgálható. Ahogy már említettük, grafénben nincs szükség kémiai adalékolásra, a töltéshordozók elektrosztatikus kapuelektrodák használatával is létrehozhatók. Ez viszont azt jelenti, hogy a konvencionális félvezető szerkezetektől eltérően grafénbeli n - p átmenetekben az elektronok kvantumos viselkedése is szerepet kaphat. Ezekben a koherens rendszerekben egy alapvető kérdés, hogy az egyik oldalról bizonyos beesési szöggel érkező elektron milyen valószínűséggel jut át az átmenet másik oldalára, és milyen irányban terjed tovább.

Cheianov, Falko és Altshuler munkái [53, 54] alapján ismert, hogy szimmetrikus és ideális átmenet esetén – azaz amikor a két oldalon a töltéshordozók sűrűsége megegyezik, és az n és p tartomány között húzódó határsáv szélessége kisebb az elektronok de Broglie hullámhosszánál – az áthaladás valószínűsége az elektron beesési szögétől $w(\theta) = \cos^2 \theta$ alakban függ. A másik határesetben, amikor a $\lambda = 2\pi/k$ hullámhossz meghaladja az átmeneti tartomány d szélességét, $w(\theta) = e^{-\pi k d \sin^2 \theta}$, azaz az átmeneten csak az azt merőlegesen ($\theta = 0$) megközelítő részecskék képesek számottevő valószínűséggel áthaladni. Érdekes viselkedést láthatunk a transzmittált részecskék haladási irányában is. Az n tartományból a vezetési sávban érkezik a részecske, az áthaladást követően viszont a p tartományban a valenciásáv állapotaként halad tovább; márpedig a valenciásávban a kvázirészecske impulzusa és sebessége ellentétes irányú, és így az impulzusmegmaradás miatt a grafénbeli elektronok egy olyan Snellius-Descartes-törvénynek engedelmeskednek a határon, amelyben a törésmutató negatív. Ebben az értelemben tehát érdemes a grafénbeli n - p átmeneteket mint elektron-optikai építőelemeket kezelni, értelmes dolog fókuszálásról, kausztikákról és lencsékről beszélni.

1.4. A dolgozat felépítése

A dolgozat 2. fejezetében a kétdimenziós spinfüggő szórásprobléma formalizmusának bemutatása után megvizsgáljuk a Mott-szórás kétdimenziós változatának szimmetriatulajdonságait. A szórási folyamat szimmetriáinak tárgyalását követően egy konkrét szórópotenciál („lokális Rasba-kölcsönhatás”) esetén egzaktul megoldjuk a szórási problémát. Belátjuk, hogy a választott konkrét szórópotenciál egy szórási folyamat során jó polarizátorként működhet a paraméterek megfelelő megválasztása esetén.

A 3. fejezetben a kétdimenziós spinfüggő szórásprobléma formalizmusát általánosítjuk a Rasba-féle Hamilton-operátor esetére, majd ebben az esetben is levezetjük a szennyezőkön való szórási folyamatokat jellemző fizikai mennyiségekre vonatkozó szimmetriarelációkat. Igazoljuk, hogy a Rasba-modellben spinfüggetlen centrális szórópotenciál is indukálhat ferde szórást és működhet polarizátorként is. A formalizmus alkalmazásaképpen megvizsgáljuk, hogy a 2DEG-en átfolyó gyenge áram milyen nemegyensúlyi spin-eloszlást indukál egy izolált szennyező környezetében.

A 4. fejezetben egy grafénbeli hengerszimmetrikus n - p átmenetet vizsgálunk a szórásprobléma eszközeivel. Kvantummechanikai és geometriai optikai számításokkal demonstráljuk, hogy a rendszer alkalmas lehet párhuzamos elektronnyaláb fókuszálására.

2. fejezet

Anomális Mott-szórás kétdimenziós elektrongázban

2.1. Bevezetés

Ebben a fejezetben a Mott-féle szórási folyamat kétdimenziós változatát tanulmányozzuk. A kétdimenziós rugalmas szórásprobléma S -mátrix formalizmusának bemutatása után levezetjük a 2DEG egy olyan modelljét, amely figyelembe veszi a kvantumgödör környezetében elhelyezkedő töltött szennyező által keltett spinfüggő potenciálteret. Ezt követően az ilyen potenciálokon történő szórási folyamatok tulajdonságait vizsgáljuk meg.

A fejezet témájához kapcsolódó eredményeket közöltünk az [55] publikációban.

2.2. Az S -mátrix formalizmus

2.2.1. Homogén rendszer

Az x - y síkban fekvő homogén 2DEG Hamilton-operátora

$$H_0 = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m^*}, \quad (2.1)$$

ahol p_x és p_y az impulzusoperátor komponensei, m^* a félvezető heterostruktúra paraméterei által meghatározott effektív tömeg, és az elektronok feles spinje miatt H_0 egy 2×2 -es diagonális mátrix, bár ezt expliciten nem jelöljük.

A rendszer Hilbert-terében tekintjük a φ_i síkbeli polárszöggel jellemzett irányba haladó $\phi_{E,\varphi_i,\sigma}(\mathbf{r}) := \chi_\sigma e^{ikr \cos(\varphi - \varphi_i)}$ síkhullámot, ahol $E > 0$, $k = \sqrt{2m^*E}/\hbar$, $\sigma \in \{\pm\}$, $\chi_+ = (1, 0)^T$ és $\chi_- = (0, 1)^T$, továbbá r és φ az \mathbf{r} helyvektor síkbeli polárkoordinátái. Könnyen belátható, hogy a fenti síkhullám H_0 sajátfüggvénye E sajátértékkel, azaz $H_0 \phi_{E,\varphi_i,\sigma} = E \phi_{E,\varphi_i,\sigma}$.

A Bessel-függvények tulajdonságait figyelembe véve bizonyítható [56], hogy a

$$\mathcal{Z}_{E,j,\sigma}(\mathbf{r}) := \chi_\sigma Z_{j-\sigma/2}(kr) e^{i(j-\sigma/2)\varphi} \quad (2.2)$$

hullámfüggvények – ahol $j \in \mathbb{J}$ (j félegész), $\sigma \in \{\pm\}$ és $Z \in \{J, Y, H^{(1)}, H^{(2)}\}$ valamelyik első- vagy másodrendű Bessel- vagy Hankel-függvényt jelöli – szintén sajátfüggvényei H_0 -nak, mégpedig a $H_0 \mathcal{Z}_{E,j,\sigma} = E \mathcal{Z}_{E,j,\sigma}$ összefüggésnek eleget téve. A továbbiakban előfordul, hogy a Hankel-függvények (1) és (2) indexei helyett rendre (+) és (−) jeleket használunk. Megállapodunk abban, hogy a továbbiakban rendre \mathcal{J} , \mathcal{Y} , $\mathcal{H}^{(+)}$ és $\mathcal{H}^{(-)}$ jelöli azokat a hullámfüggvényeket, amelyeket (2.2)-ből Z -t J -re, Y -ra, $H^{(+)}$ -ra és $H^{(-)}$ -ra cserélve kapunk meg. A fenti $\mathcal{Z}_{E,j,\sigma}$ függvényeket *hengerhullámoknak* fogjuk hívni. A $\mathcal{H}_{E,j,\sigma}^{(+)}$ függvényeket

kifutó, a $\mathcal{H}_{E,j,\sigma}^{(-)}$ függvényeket pedig *befutó* hengerhullámoknak nevezzük, mert az általuk definiált radiális áramsűrűség

$$j_r(\mathbf{r}) := \mathbf{e}_r(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) = \mathbf{e}_r(\mathbf{r}) \cdot \text{Re} \left\{ \left[\mathcal{H}_{E,j,\sigma}^{(\pm)}(\mathbf{r}) \right]^\dagger \frac{\mathbf{p}}{m^*} \mathcal{H}_{E,j,\sigma}^{(\pm)}(\mathbf{r}) \right\} = \pm \frac{2}{\pi k} \frac{\hbar k}{m^*} \frac{1}{r}, \quad (2.3)$$

ahol $\mathbf{e}_r(\mathbf{r}) := (\cos \varphi, \sin \varphi)^T$. Megjegyezzük, hogy rögzített E , j , és σ indexek esetén a négy lehetséges $\mathcal{Z}_{E,j,\sigma}$ hengerhullám halmazának bármely kételemű részhalmaza lineárisan független, és bármely háromelemű részhalmaza lineárisan összefüggő [56].

További lényeges állítás, hogy bármely fenti síkhullám egyértelműen felbontható „parciális hullámok”, azaz hengerhullámok összegére [56]:

$$\phi_{E,\varphi_i,\sigma}(\mathbf{r}) = \sum_{j \in \mathbb{J}} i^{j-\sigma/2} \mathcal{J}_{E,j,\sigma}(\mathbf{r}) e^{-i(j-\sigma/2)\varphi_i} = \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathbb{J}} i^{j-\sigma/2} \left[\mathcal{H}_{E,j,\sigma}^{(+)}(\mathbf{r}) + \mathcal{H}_{E,j,\sigma}^{(-)}(\mathbf{r}) \right] e^{-i(j-\sigma/2)\varphi_i}. \quad (2.4)$$

2.2.2. Az S -mátrix

Vizsgáljuk a kétdimenziós elektrongáz elektronjainak rugalmas szóródását egy hermitikus $V(\mathbf{r})$ potenciálon. A potenciálról feltételezzük, hogy véges hatósugarú, azaz egy bizonyos R sugarú körön kívül eltűnik. Nem tételezzük viszont fel azt, hogy V spinfüggetlen. A kétdimenziós elektrongáz részecskéinek dinamikáját leíró Hamilton-operátor véges hatósugarú potenciál jelenlétében tehát egy 2×2 -es mátrix, $H = H_0 + V(\mathbf{r})$.

Az előző szakaszban definiált hullámfüggvények esetén a továbbiakban elhagyjuk az energiára utaló E indexet. Ekkor a szórásprobléma matematikai megfogalmazása a következő: adott E energiájú, $\phi_{\varphi_i,\sigma}$ alakú síkhullám esetén keressük azt a $\psi_{\varphi_i,\sigma}$ hullámfüggvényt, melyre teljesül, hogy (1) $\psi_{\varphi_i,\sigma}$ reguláris, (2) $H\psi_{\varphi_i,\sigma} = E\psi_{\varphi_i,\sigma}$, és (3) $\psi_{\varphi_i,\sigma}^{(\text{sc})} := \psi_{\varphi_i,\sigma} - \phi_{\varphi_i,\sigma}$ az R sugarú körön kívül előáll kifutó hengerhullámok soraként. A továbbiakban az itt definiált $\psi_{\varphi_i,\sigma}$ függvényre mint *teljes hullámra*, a $\psi_{\varphi_i,\sigma}^{(\text{sc})}$ függvényre pedig mint *szórt hullámra* hivatkozunk.

A síkhullámok parciális felbontására vonatkozó (2.4) összefüggés azt sugallja, hogy a síkhullámok szóródását leíró teljes hullám megkonstruálható az egyes befutó hengerhullámok szóródását leíró hullámfüggvények segítségével. Mi ezt az utat választjuk, először tehát vizsgáljuk a $\mathcal{H}_{j,\sigma}^{(-)}$ befutó hengerhullám szóródását. Mivel rugalmas szóródást vizsgálunk, ezért a fenti befutó hengerhullám vele azonos energiájú kifutó hullámként szóródhat, azaz az

$r > R$ tartományban a hengerhullám szóródását leíró hullámfüggvény felírható

$$\psi_{j,\sigma}(\mathbf{r}) = \mathcal{H}_{j,\sigma}^{(-)}(\mathbf{r}) + \sum_{\sigma' \in \{\pm\}} \sum_{j' \in \mathbb{J}} S_{j'j}^{(\sigma'\sigma)} \mathcal{H}_{j',\sigma'}^{(+)}(\mathbf{r}) \quad (2.5)$$

alakban. Ha a fenti $\psi_{j,\sigma}$ hullámfüggvényben az $S_{j'j}^{(\sigma'\sigma)}$ együtthatókat önkényesen választjuk, akkor általában nem terjeszthető ki a hullámfüggvény a teljes síkra úgy, hogy a kiterjesztés reguláris energiasajátállapot legyen. Adott E energia és V szórópotenciál esetén pontosan egy olyan együttható-rendszer létezik, amit $\psi_{j,\sigma}$ -ba beírva olyan hullámfüggvényt kapunk, amely az $r < R$ tartományra kiterjeszthető úgy, hogy a kiterjesztés eredménye H -nak egy E energiájú reguláris sajátfüggvénye. Az ezen együtthatókból alkotott mátrixot nevezzük a továbbiakban S -mátrixnak, ami tehát függ mind a szórási energiától, mind pedig a szórópotenciál konkrét alakjától. A dolgozat ezen szakaszában nem foglalkozunk azokkal a kérdésekkel, hogy adott energia és szórópotenciál esetén hogyan lehet meghatározni az S -mátrixot, és hogy hogyan kell kiterjeszteni a hullámfüggvényt az $r < R$ tartományra.

Ezután rátérünk a síkhullám szóródását leíró teljes hullám megkonstruálására: a (2.4) parciális felbontás és az S -mátrix (2.5) definíciójának egyenes következménye, hogy a

$$\psi_{\varphi_i,\sigma}^{(\text{sc})}(\mathbf{r}) := \frac{1}{2} \sum_{\sigma' \in \{\pm\}} \sum_{j,j' \in \mathbb{J}} i^{j-\sigma/2} F_{j'j}^{(\sigma'\sigma)} \mathcal{H}_{j',\sigma'}^{(+)}(\mathbf{r}) e^{-i(j-\sigma/2)\varphi_i}, \quad (2.6)$$

és $F_{j'j}^{(\sigma'\sigma)} := S_{j'j}^{(\sigma'\sigma)} - \delta_{j'j} \delta_{\sigma'\sigma}$ választással a $\psi_{\varphi_i,\sigma} = \phi_{\varphi_i,\sigma} + \psi_{\varphi_i,\sigma}^{(\text{sc})}$ hullámfüggvény teljesíti a szórásprobléma megoldására kirótt mindhárom feltételt az $r > R$ tartományban.

Egyszerű tény, hogy a $\phi_{\varphi_i,\sigma}$ síkhullámok sajátállapotai az elektronspin z -komponensének, azaz a σ_z operátornak, mégpedig éppen σ sajátértékkel. A továbbiakban szeretnénk kiterjeszteni a szórásproblémát adott hullámszámvektorú, de nem feltétlenül σ_z -sajátállapot síkhullámokra is. Ezek általános alakja

$$\phi_{\varphi_i,\gamma} = \sum_{\sigma \in \{\pm\}} \gamma_{\sigma} \phi_{\varphi_i,\sigma}, \quad (2.7)$$

ahol $\gamma = (\gamma_+, \gamma_-)^T \in \mathbb{S}_1(\mathbb{C}^2)$, azaz γ egy kétkomponensű egységnyi normájú komplex vektor. A Schrödinger-egyenlet linearitásának következménye, hogy egy ilyen síkhullámhoz tartozó szórt hullám alakja

$$\psi_{\varphi_i,\gamma}^{(\text{sc})} = \sum_{\sigma \in \{\pm\}} \gamma_{\sigma} \psi_{\varphi_i,\sigma}^{(\text{sc})}. \quad (2.8)$$

2.2.3. Sűrűségmátrix-formalizmus

Ezidág csupán az általunk vizsgált kvantummechanikai rendszer *tiszta állapotairól* ejtettünk szót. A szórási mechanizmus leírását azonban szeretnénk kiterjeszteni olyan esetekre is, amikor a síkhullám ugyan jól meghatározott hullámszámvektorral rendelkezik, de spinállapota valamilyen statisztikus keveréke a lehetséges tiszta spinállapotoknak. Ez elkerülhetetlen, ha részlegesen polarizált vagy teljesen polarizálatlan elektronnyalábok szóródását akarjuk leírni. Az alábbiakban ezért összefoglaljuk a sűrűségmátrix-formalizmus néhány alapfogalmát. A formalizmussal kapcsolatos további definíciók és tételek vonatkozásában Diósi Lajos tankönyvére hivatkozunk [57].

Tekintsünk egy feles spinű részecskét, és tegyük fel, hogy nem ismerjük az azt leíró pontos hullámfüggvényt, viszont a következő statisztikus információval bírunk: w_m valószínűséggel a ψ_m állapotban van a részecske, ahol $m = 1, \dots, n$. Természetesen fennáll a $\sum_{m=1}^n w_m = 1$ összefüggés. Ezt a valószínűségi értelemben vett, ún. *kevert állapotot* jellemezhetjük a $\mathcal{R}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') := \sum_{m=1}^n w_m \psi_m(\mathbf{r}) [\psi_m(\mathbf{r}')]^\dagger$ *sűrűségmátrixszal*. Itt \dagger a kétkomponensű komplex vektor transzponáltjának komplex konjugáltját jelöli, tehát bármely \mathbf{r} és \mathbf{r}' esetén $\mathcal{R}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ egy 2×2 -es komplex mátrix. Az \mathcal{R} kevert állapot *spin-sűrűségmátrixa* az \mathbf{r} helyen pedig legyen

$$\rho(\mathbf{r}) := \frac{\mathcal{R}(\mathbf{r}, \mathbf{r})}{\text{Tr}[\mathcal{R}(\mathbf{r}, \mathbf{r})]}. \quad (2.9)$$

Definíciónak tekintjük, hogy az \mathcal{R} sűrűségmátrixszal jellemzett kevert állapot *polarizációja* az \mathbf{r} helyen

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) := \text{Tr}[\boldsymbol{\sigma} \rho(\mathbf{r})]. \quad (2.10)$$

Szintén definíciónak vesszük, hogy a fenti \mathcal{R} állapotban a részecskeáram-sűrűség (a továbbiakban egyszerűen csak *áram-sűrűség*) az \mathbf{r} pontban

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) := \text{Tr} \{ \mathbf{v}^{(1)} \mathcal{R}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \}, \quad (2.11)$$

ahol $\mathbf{v}^{(1)}$ a mögötte álló függvénynek „csak az első változójára hat”, mégpedig úgy, mint a $\mathbf{v} = \frac{i}{\hbar} [H, \mathbf{r}]$ sebességoperátor, ami $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m^*$ alakú, ha H éppen a (2.1) képletben definiált H_0 operátor.

Qubit-sűrűségmátrixnak nevezzük azokat a 2×2 -es komplex hermitikus mátrixokat, amelyeknek mindkét sajátértéke nemnegatív és a két sajátérték összege 1. Belátható, hogy bármely kevert állapot spin-sűrűségmátrixa a tér bármely pontjában qubit-sűrűségmátrix.

Térjünk vissza a szórásprobléma tárgyalására. Tekintsük rögzített E energia és φ_i haladási irány esetén a tiszta spinállapotú síkhullámok egy statisztikus keverékét: legyen $\{\gamma^{(m)} \in \mathbb{S}_1(\mathbb{C}^2)\}_{m=1,\dots,n}$, $\{w_m \in \mathbb{R}^+\}_{m=1,\dots,n}$, $\sum_{m=1}^n w_m = 1$; vizsgáljuk a következő kevert állapotot:

$$\mathcal{R}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{m=1}^n w_m \phi_{\varphi_i, \gamma^{(m)}}(\mathbf{r}) [\phi_{\varphi_i, \gamma^{(m)}}(\mathbf{r}')]^\dagger. \quad (2.12)$$

Egyszerűen belátható a következő három állítás: (1) ha bevezetjük a

$$\rho_0 := \sum_{m=1}^n w_m \gamma^{(m)} [\gamma^{(m)}]^\dagger \quad (2.13)$$

jelölést, akkor bármely \mathbf{r}, \mathbf{r}' esetén

$$\mathcal{R}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \rho_0 e^{ik[r \cos(\varphi - \varphi_i) - r' \cos(\varphi' - \varphi_i)]}, \quad (2.14)$$

(2) bármely \mathbf{r} helyvektorra $\rho(\mathbf{r}) = \rho_0$; és (3) ρ_0 qubit-sűrűségmátrix. Ez viszont azt jelenti, hogy egy rögzített hullámszámvektorhoz tartozó bármely kevert állapot jellemezhető egy ρ_0 qubit-sűrűségmátrixszal, azaz a kevert állapot a w_m faktoroktól és a $\gamma^{(m)}$ spinoroktól expliciten nem, csak a ρ_0 -on keresztül függ. A továbbiakban a (2.12) egyenletben szereplő \mathcal{R} kevert állapotot $\mathcal{R}_{\varphi_i, \rho_0}$ -al jelöljük és *beeső nyalábnak* nevezzük, a ρ_0 mátrixot a *beeső nyaláb spin-sűrűségmátrixának* hívjuk, és a $\mathbf{P}_0 := \text{Tr}(\sigma \rho_0)$ valós háromkomponensű vektort pedig a *beeső nyaláb polarizációvektorának* fogjuk nevezni. Értelmes definiálni egy adott (2.12) alakú beeső nyalábhoz tartozó *szórt nyaláb* állapotát a következő módon:

$$\mathcal{R}^{(\text{sc})}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') := \sum_{m=1}^n w_m \psi_{\varphi_i, \gamma^{(m)}}^{(\text{sc})}(\mathbf{r}) [\psi_{\varphi_i, \gamma^{(m)}}^{(\text{sc})}(\mathbf{r}')]^\dagger = \sum_{\sigma, \sigma' \in \{\pm\}} \psi_{\varphi_i, \sigma}^{(\text{sc})}(\mathbf{r}) (\rho_0)_{\sigma, \sigma'} [\psi_{\varphi_i, \sigma'}^{(\text{sc})}(\mathbf{r}')]^\dagger. \quad (2.15)$$

Az utóbbi egyenlőségből látszik, hogy a szórt nyaláb állapotát egyértelműen meghatározza a beeső nyaláb ρ_0 spin-sűrűségmátrixa. A (2.15) egyenletben szereplő szórt nyalábot a továbbiakban $\mathcal{R}_{\varphi_i, \rho_0}^{(\text{sc})}$ -al jelöljük.

2.2.4. Hatáskeresztmetszet

A differenciális szórási hatáskeresztmetszet a szóráselmélet központi fogalma. Mind a klasszikus, mind a kvantummechanikai elméletben a hatáskeresztmetszet arról hordoz

információt, hogy a szórócentrumra beeső részecskék milyen intenzitással szóródnak a különböző szögtartományokba [58]. Mivel ez a mennyiség a szórási állapotok szórócentrumtól aszimptotikusan távoli viselkedéséből definiálandó, ezért a bevezetéséhez szükségünk van a $\mathcal{H}_{j,\sigma}^{(+)}$ kifutó hengerhullámok nagy r értékek esetén érvényes aszimptotikus alakjára.

Az elsőrendű $H_\nu^{(+)}$ Hankel-függvények nagy argumentumokra közelíthetők a Hankel-sorok első tagjával, azaz a $\tilde{H}_\nu^{(+)}(x) := \sqrt{\frac{2}{\pi x}} e^{i(x-\nu\pi/2-\pi/4)}$ függvénnyel [56]. A közelítés pontossága $O(x^{-3/2})$, tehát a szórt hullámok $O(r^{-3/2})$ rendű közelítését adja az a $\tilde{\psi}_{\varphi_i,\gamma}^{(\text{sc})}$ hullámfüggvény, amit $\psi_{\varphi_i,\gamma}^{(\text{sc})}$ -ből úgy kapunk, hogy benne az összes $H^{(+)}$ -t $\tilde{H}^{(+)}$ -ra cseréljük. Világos, hogy $\tilde{\psi}_{\varphi_i,\gamma}^{(\text{sc})}$ annál jobban közelíti a szórt hullámot, minél távolabb vagyunk az origótól. A $\tilde{\psi}_{\varphi_i,\gamma}^{(\text{sc})}$ hullámfüggvényt a továbbiakban a *szórt hullám aszimptotikus alakjának* nevezzük.

Definiáljuk a *szórási amplitúdó mátrixot* az S -mátrix segítségével az alábbi módon:

$$f_{\sigma',\sigma}(\varphi, \varphi_i) := \frac{1}{\sqrt{2\pi i k}} \sum_{j', j \in \mathbb{J}} e^{i(j'-\sigma'/2)(\varphi-\pi/2)} F_{j'j}^{(\sigma',\sigma)} e^{-i(j-\sigma/2)(\varphi_i-\pi/2)}, \quad (2.16)$$

ahol $\sigma, \sigma' \in \{\pm\}$. Tehát adott φ és φ_i esetén $f(\varphi, \varphi_i)$ egy 2×2 -es komplex mátrix. Természetesen f az S -mátrixon keresztül függ az energiától is, de ezt sem itt, sem a továbbiakban nem jelöljük. Elemi számolás bizonyítja, hogy a szórt hullám aszimptotikus alakja és a fent definiált szórási amplitúdó mátrix között fennáll a következő ismerős összefüggés:

$$\tilde{\psi}_{\varphi_i,\gamma}^{(\text{sc})}(\mathbf{r}) = \frac{e^{ikr}}{\sqrt{r}} f(\varphi, \varphi_i) \gamma. \quad (2.17)$$

Mivel $\tilde{\psi}_{\varphi_i,\gamma}^{(\text{sc})}$ nagy r -ekre jól közelíti a $\psi_{\varphi_i,\gamma}^{(\text{sc})}$ függvényt, ezért (2.15) és (2.17) következménye, hogy a

$$\tilde{\mathcal{R}}_{\varphi_i,\rho_0}^{(\text{sc})}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') := \frac{1}{\sqrt{rr'}} e^{ik(r-r')} f(\varphi, \varphi_i) \rho_0 [f(\varphi', \varphi_i)]^\dagger \quad (2.18)$$

képlettel definiált sűrűségmátrix, amit a továbbiakban a *szórt nyaláb aszimptotikus alakjának* nevezünk, nagy r és r' esetén jól közelíti a $\mathcal{R}_{\varphi_i,\rho_0}^{(\text{sc})}$ sűrűségmátrixot.

Belátható, hogy az $\mathcal{R}_{\varphi_i,\rho_0}$ beeső nyalábban a (2.11) definícióval értelmezett áramsűrűség nagysága bármely \mathbf{r} pontban $\hbar k/m^* =: j_0$. Jelölje továbbá az $\mathcal{R}_{\varphi_i,\rho_0}^{(\text{sc})}$ szórt nyaláb \mathbf{r} pontján az áramsűrűség-vektor radiális komponensét $j_r(\mathbf{r}; \varphi_i, \rho_0)$. Definiáljuk a *differenciális szórási hatáskeresztmetszetet* az alábbi formulával [58]:

$$\sigma_{\text{diff}}(\varphi, \varphi_i, \rho_0) := \frac{\lim_{r \rightarrow \infty} r j_r(r, \varphi; \varphi_i, \rho_0)}{j_0}. \quad (2.19)$$

Ha ki akarjuk számolni a differenciális hatáskeresztmetszetet a szórt nyaláb ismeretében, akkor nyugodtan helyettesíthetjük a szórt nyalábot annak aszimptotikus alakjával, hiszen végül úgyis a $r \rightarrow \infty$ határértéket kell vennünk. Ezt figyelembe véve elemi úton származtatható (2.11), (2.18) és (2.19) segítségével, hogy

$$\sigma_{\text{diff}}(\varphi, \varphi_i, \rho_0) = \text{Tr} \left\{ f(\varphi, \varphi_i) \rho_0 [f(\varphi, \varphi_i)]^\dagger \right\}. \quad (2.20)$$

A teljes szórási hatáskeresztmetszet definíciója

$$\sigma_{\text{tot}}(\varphi_i, \rho_0) := \int_0^{2\pi} \sigma_{\text{diff}}(\varphi, \varphi_i, \rho_0) d\varphi. \quad (2.21)$$

Szokás még definiálni a *transzport-hatáskeresztmetszetet* is:

$$\sigma_{\text{tr}}(\varphi_i, \rho_0) := \int_0^{2\pi} [1 - \cos(\varphi - \varphi_i)] \sigma_{\text{diff}}(\varphi, \varphi_i, \rho_0) d\varphi. \quad (2.22)$$

Látható, hogy mindhárom hatáskeresztmetszet jellegű mennyiség függ a beeső nyaláb spinállapotától a ρ_0 spin-sűrűségmátrixon keresztül.

A szórási amplitúdó mátrix, mint minden 2×2 komplex mátrix, egyértelműen kifejezhető a σ_0 egységmátrix és a Pauli-mátrixok lineárkombinációjaként, azaz az u_0, u_1, u_2, u_3 mennyiségek definíciójaként értelmezhető az alábbi összefüggés:

$$f(\varphi, \varphi_i) = \sum_{i=0}^3 u_i(\varphi, \varphi_i) \sigma_i. \quad (2.23)$$

Ezt a dekompozíciót a szórási amplitúdó mátrix *Pauli-felbontásának* nevezzük a továbbiakban. A Pauli-felbontás segítségével a differenciális szórási hatáskeresztmetszet (2.20) alakját kifejezhetjük a beeső nyaláb polarizációvektorának függvényeként az alábbi alakban:

$$\sigma_{\text{diff}}(\varphi, \varphi_i, \mathbf{P}_0) = c(\varphi, \varphi_i) + \mathbf{v}(\varphi, \varphi_i) \cdot \mathbf{P}_0, \quad (2.24)$$

ahol

$$c := \sum_{i=0}^3 |u_i|^2, \quad (2.25)$$

$$\mathbf{v} := 2\text{Re}(u_0^* \mathbf{u}) - i(\mathbf{u} \times \mathbf{u}^*). \quad (2.26)$$

Itt bevezettük a $\mathbf{u} := (u_1, u_2, u_3)^T$ jelölést, \times pedig a szokásos vektoriális szorzást jelenti. Mivel a teljes- és a transzport-hatáskeresztmetszetet σ_{diff} -ből definiáltuk, ezért természetesen azok is kifejezhetők a beeső nyaláb polarizációvektorának függvényeként.

2.2.5. Polarizáció

A differenciális szórási hatáskeresztmetszet mellett a spinfüggő szórási folyamatokat jellemző másik mennyiség a szórt nyaláb polarizációvektora a szórócentrumtól távol, vagy más néven az aszimptotikus polarizáció. Általában ez a mennyiség is függ a beeső nyaláb polarizációvektorától, ahogy azt látni is fogjuk.

Egyszerű számolás eredménye, hogy a szórt nyaláb $\tilde{\mathcal{R}}_{\varphi_i, \rho_0}^{(\text{sc})}$ aszimptotikus alakjának $\tilde{\mathbf{P}}^{(\text{sc})}$ polarizációvektora az \mathbf{r} pontban a (2.10) definíció alapján

$$\tilde{\mathbf{P}}^{(\text{sc})}(\mathbf{r}; \varphi_i, \rho_0) = \frac{\text{Tr} [f(\varphi, \varphi_i) \rho_0 f^\dagger(\varphi, \varphi_i) \boldsymbol{\sigma}]}{\sigma_{\text{diff}}(\varphi, \varphi_i, \rho_0)}. \quad (2.27)$$

Szemléletesebb alakhoz jutunk, ha a beeső nyaláb ρ_0 spin-sűrűségmátrixa helyett annak \mathbf{P}_0 polarizációvektorával fejezzük ki az aszimptotikus polarizációt. Az f Pauli-felbontását felhasználva kapjuk, hogy

$$\tilde{\mathbf{P}}^{(\text{sc})}(\mathbf{r}, \varphi_i, \mathbf{P}_0) = \frac{\mathbf{w}(\varphi, \varphi_i) + \mathcal{M}(\varphi, \varphi_i) \mathbf{P}_0}{\sigma_{\text{diff}}(\varphi, \varphi_i, \mathbf{P}_0)}, \quad (2.28)$$

ahol

$$\mathbf{w} := 2\text{Re}(u_0^* \mathbf{u}) + i(\mathbf{u} \times \mathbf{u}^*), \quad (2.29)$$

$$\mathcal{M}_{ij} := (|u_0|^2 - |\mathbf{u}|^2) \delta_{ij} + 2\text{Re}(u_i^* u_j) + 2 \sum_{l=1}^3 \varepsilon_{ijl} \text{Im}(u_0^* u_l). \quad (2.30)$$

Itt $i, j \in \{1, 2, 3\}$, δ_{ij} a Kronecker-delta és ε_{ijl} a Levi-Civita-szimbólum. A szórt nyaláb polarizációvektora tehát a szórócentrumtól távol független a radiális koordinátától, csak a

beeső nyaláb haladási φ_i irányától, a φ szögtől és a beeső nyaláb \mathbf{P}_0 polarizációvektorától (és persze az energiától) függ.

2.3. A modell

A dolgozat Bevezetésében már említettük, hogy bizonyos félvezetők szabályos kristályrácsában ülő töltött szennyezők hatása az anyag vezetési elektronjaira az alábbi Hamilton-operátorral modellezhető:

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m^*} + V + \frac{\lambda}{\hbar} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} \times \nabla V), \quad (2.31)$$

ahol a második tag írja le a szennyező által keltett centrális elektrosztatikus potenciált, a harmadik az ebből adódó spin-pálya járulékot, λ pedig az anyagra jellemző paraméter. Ebben a szakaszban ebből a Hamilton-operátorból kiindulva levezetjük a 2DEG egy olyan modelljét, amely figyelembe veszi a 2DEG közelében elhelyezkedő szennyezők által keltett spin-pálya-potenciált is.

Legyen adott egy $V_{\text{conf}}(z; d)$ elektrosztatikus potenciál, ami az elektronok z -irányú mozgását a $z = 0$ sík körüli kis tartományra korlátozza, így létrehozva a kétdimenziós elektronrendszert; d a potenciálvölgy karakterisztikus méretét jelöli. Feltesszük, hogy V_{conf} tükrörszimmetrikus az x - y síkra, azaz $V_{\text{conf}}(z; d) = V_{\text{conf}}(-z; d)$. Legyen egy töltött szennyező az x - y síktól z_0 távolságra levő $\mathbf{r}_0 = (0, 0, z_0)$ pontban, és tegyük fel, hogy a szennyező egy V_i gömbszimmetrikus potenciált kelt. Ekkor a háromdimenziós Hamilton-operátor (2.31) alakú, ahol ebben az esetben $V = V_{\text{conf}} + V_i$ a rendszerben jelenlevő teljes elektrosztatikus potenciál. A háromdimenziós Hamilton-operátorból a 2DEG elektronjait leíró effektív kétdimenziós Hamilton-operátor származtathatunk a szokásos perturbatív eljárással [59, 60]. Tekintjük a $H_z := p_z^2/(2m^*) + V_{\text{conf}}(z; d)$ skalár Hamilton-operátor egykomponensű $\phi_0(z; d)$ alapállapot hullámfüggvényét, amely z -ben szimmetrikus, és valósnak választjuk. Továbbá feltesszük, hogy a 2DEG d szélessége elég kicsi ahhoz, hogy H_z gerjesztett állapotainak hatását elhanyagolhatjuk. Ekkor tehát a 2DEG-et leíró kétdimenziós 2×2 -es effektív Hamilton-operátort az alábbi formulával definiálhatjuk:

$$H_{2D} = \lim_{d \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dz \phi_0(z; d) \left\{ \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m^*} + V_i(x, y, z) + \frac{\lambda}{\hbar} \boldsymbol{\sigma} \cdot [\mathbf{p} \times \nabla V(x, y, z)] \right\} \phi_0(z; d), \quad (2.32)$$

ahol a kapcsos zárójelek belül természetesen a $H - H_z$ perturbáció szerepel. Az így kapott

H_{2D} az x - y síkban értelmezett hullámfüggvényekre hat, és az idealizált, végtelen vékony 2DEG elektronjait írja le. Kihasználva, hogy V_{conf} szimmetrikus a 2DEG síkjára, kapjuk:

$$H_{2D} = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m^*} + V_i + \frac{\lambda}{2\hbar} [\sigma_x \{p_y, (\partial_z V_i)\} - \sigma_y \{p_x, (\partial_z V_i)\}] + \frac{\lambda}{\hbar} \sigma_z [(\partial_y V_i)p_x - (\partial_x V_i)p_y], \quad (2.33)$$

ahol $\{.,.\}$ az antikommutátort jelöli, és a rövidség kedvéért nem írtuk ki expliciten $V_i(x, y, 0)$ argumentumait.

A továbbiakban áttérünk a síkbeli (r, φ) polárkoordinátákra, $V_i(r) = V_i(r, \varphi) = V_i(x, y, 0)$ és $\nabla V_i(r, \varphi) = \nabla V_i(x, y, 0)$ (tehát a ∇ szimbólum továbbra is háromdimenziós gradienst jelent). Mivel V_i gömbszimmetrikus az \mathbf{r}_0 pont körül, ezért a 2DEG síkjában a potenciál gradiense

$$\nabla V_i(r, \varphi) = W_r(r)\mathbf{e}_r(\varphi) + W_z(r)\mathbf{e}_z \quad (2.34)$$

alakú, ahol $\mathbf{e}_r(\varphi) = (\cos \varphi, \sin \varphi, 0)$, $\mathbf{e}_z = (0, 0, 1)$, és W_r és W_z a V_i potenciál ismeretében származtatható. Ahogy az a (2.34) képletből látható, rendre W_r és W_z jellemzi a szennyező által keltett elektromos tér síkbeli és síkra merőleges komponensét. A kétdimenziós Hamilton-operátor síkbeli polárkoordinátákkal kifejezve:

$$H_{2D} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\partial_r^2 + \frac{1}{r} \partial_r + \frac{1}{r^2} \partial_\varphi^2 \right) + V_i(r) + \frac{i\lambda}{2} \left[\sigma_\varphi \{ \partial_r, W_z(r) \} - \frac{2}{r} \sigma_r W_z(r) \partial_\varphi \right] + i\lambda \frac{1}{r} \sigma_z W_r(r) \partial_\varphi, \quad (2.35)$$

ahol $\sigma_r = \mathbf{e}_r \cdot \boldsymbol{\sigma}$, $\sigma_\varphi = \mathbf{e}_\varphi \cdot \boldsymbol{\sigma}$ és $\mathbf{e}_\varphi(\varphi) = (-\sin \varphi, \cos \varphi, 0)$.

Az így kapott H_{2D} tehát a 2DEG egy olyan modell Hamilton-operátora, amely figyelembe veszi a 2DEG környezetében található szennyezők által keltett spin-pálya-potenciált, azaz módot ad arra, hogy a Mott-szórás kétdimenziós változatának tulajdonságait tanulmányozzuk. Megjegyezzük, hogy a (2.35) operátorhoz hasonló kétdimenziós Hamilton-operátor levezetése szerepel az [59] publikációban, azzal a lényeges különbséggel, hogy ott a W_z -vel arányos tag nem szerepel a végeredményben. Ez annak az esetnek felel meg, amikor a szennyező a 2DEG síkjában helyezkedik el ($z_0 = 0$), hiszen ilyenkor (2.34) alapján W_z eltűnik. Ha azonban a szennyező nem a 2DEG síkjában van, akkor a W_z -vel arányos tag lényeges szerepet játszik a spinfüggő szórási folyamatokban: látni fogjuk, hogy ezen tag miatt a szórási folyamat szimmetriatulajdonságai különböznek a háromdimenziós Mott-szórás

tulajdonságaitól, és hogy bizonyos spinfüggő effektusok a háromdimenziós esettől eltérően már az első Born-közelítésben is megjelenhetnek. Tudomásunk szerint az ezidáig megjelent, a 2DEG-ben lejátszódó spinfüggő transzportfolyamatok (extrinsic spin Hall-effektus, anomális Hall-effektus) elméleti leírását célzó munkákban sem vették figyelembe a W_z -vel arányos tagot, ld. például [61–64].

2.4. Szimmetriák analízise

A 2.2. szakaszban véges hatósugarú, de egyébként teljesen általános V szórópotenciál esetére megadtuk, hogy két dimenzióban a hatáskeresztmetszetek és a szórt nyaláb aszimptotikus polarizációja hogyan számítható ki a szórópotenciált jellemző S -mátrix segítségével. A 2.3. szakaszban kiszámoltuk, hogy a 2DEG közelében elhelyezkedő szennyező spinpálya-potenciáltere milyen formában jelenik meg a kétdimenziós Hamilton-operátorban. Ebben a szakaszban megvizsgáljuk, hogy a szennyező potenciáltere milyen szimmetriatulajdonságokkal rendelkezik, és hogy ezek a szimmetriatulajdonságok milyen következményeket vonnak maguk után a szennyezőkön történő szórási folyamatokra nézve. Az analízis azon az egyszerű tényen alapul, hogy ha a rendszer teljes Hamilton-operátora kommutál egy másik operátorral, akkor ez bizonyos megszorításokat jelent a szórópotenciált jellemző S -mátrixra vonatkozólag, ennek révén pedig a szórást leíró további fizikai mennyiségek (hatáskeresztmetszet, polarizáció) alakja is leegyszerűsödik.

Elemi számítás igazolja, hogy a 2.3. szakaszban levezetett H_{2D} (a továbbiakban csak H) kétdimenziós Hamilton-operátor kommutál az időtükrözés operátorával ($i\sigma_y C$, ahol C a komplex konjugálás operátora), a teljes impulzusmomentum operátorával ($J_z = L_z + S_z$, ahol $L_z = -i\hbar\partial_\varphi$ és $S_z = \hbar\sigma_z/2$), és egy speciálisan megválasztott kombinált tértükrözés-spinforgatás operátorral ($\sigma_y P_x$, ahol P_x az x tengelyre való tükrözés operátora). Az alábbi szimmetriaanalízis során csak ezeket a tényeket használjuk fel, nem hivatkozunk a szennyező potenciálterének konkrét alakjára, így az ebben a szakaszban közölt állítások valójában nem csak a H Hamilton-operátorral leírt rendszerekre igazak, hanem minden olyan szórópotenciál esetén, amely rendelkezik a fent említett három szimmetriatulajdonsággal. Az ilyen szórópotenciálokat – tehát amelyek véges hatósugarúak, és felcserélhetők az $i\sigma_y C$, J_z és $\sigma_y P_x$ operátorokkal – a továbbiakban a rövidség kedvéért *egyszerű potenciáloknak* nevezzük.

Vizsgáljuk először a rendszer forgásinvarianciájának, azaz a $[H, J_z] = 0$ feltételnek a következményét. Azt állítjuk, hogy forgásinvariáns rendszerben a szórócentrumot leíró S -

mátrixra igaz, hogy

$$S_{j'j}^{(\sigma'\sigma)} = \delta_{j'j} S_{j'j}^{(\sigma'\sigma)}, \quad (2.36)$$

azaz az S -mátrix diagonális az impulzusmomentum-indexében. Ennek belátásához tekintünk egy tetszőleges $\{a_{j,\sigma} \in \mathbb{C} \mid j \in \mathbb{J}, \sigma \in \{\pm\}\}$ paraméterhalmazt (vektort), és a (2.5) egyenletben definiált, adott E energiához tartozó $\psi_{j\sigma}$ hullámfüggvények alábbi lineárkombinációját:

$$\psi = \sum_{j \in \mathbb{J}} \sum_{\sigma \in \{\pm\}} a_{j,\sigma} \psi_{j,\sigma}. \quad (2.37)$$

Mivel ψ a H operátor sajátállapota E sajátértékkel és $[H, J_z] = 0$, ezért $J_z \psi$ is energia-sajátállapota H -nak ugyanezzel az E sajátértékkel. Egyszerű számolás mutatja, hogy igaz a következő két összefüggés:

$$\psi = \sum_{j \in \mathbb{J}} \sum_{\sigma \in \{\pm\}} a_{j\sigma} \mathcal{H}_{j\sigma}^{(-)} + (Sa)_{j\sigma} \mathcal{H}_{j\sigma}^{(+)}, \quad (2.38)$$

$$J_z \psi = \sum_{j \in \mathbb{J}} \sum_{\sigma \in \{\pm\}} (Ta)_{j\sigma} \mathcal{H}_{j\sigma}^{(-)} + (TSa)_{j\sigma} \mathcal{H}_{j\sigma}^{(+)}, \quad (2.39)$$

ahol $T_{j'j}^{(\sigma'\sigma)} := \delta_{\sigma'\sigma} \delta_{j'j}$, és a mátrixok és vektorok szorzatait az

$$(Sa)_{j\sigma} = \sum_{j' \in \mathbb{J}} \sum_{\sigma' \in \{\pm\}} S_{j,j'}^{(\sigma,\sigma')} a_{j',\sigma'} \quad (2.40)$$

szabálynak megfelelően definiáljuk. Mivel az S -mátrix adott energián egyértelműen definiált, ezért a (2.38) és a (2.39) összefüggésekből következik, hogy $TSa = STa$ bármely a vektorra, azaz $TS = ST$, vagyis $S_{j'j}^{(\sigma'\sigma)} = S_{j'j}^{(\sigma'\sigma)} j/j'$. Ez pedig éppen egyenértékű az állítással.

Hasonló módon látható be, hogy ha a rendszernek szimmetriája az időtükrözés, azaz $[H, i\sigma_y C] = 0$, akkor

$$S_{j'j}^{(\sigma'\sigma)} = (-1)^{j'+j+1} S_{-j,-j'}^{(-\sigma,-\sigma')}. \quad (2.41)$$

A $[H, \sigma_y P_x] = 0$ reláció következménye pedig

$$S_{j'j}^{(\sigma'\sigma)} = (-1)^{j'+j+1} S_{-j',-j}^{(-\sigma',-\sigma)}. \quad (2.42)$$

A következő alfejezetekben három példát mutatunk az S -mátrix fenti szimmetria-relációinak fizikai következményeire.

2.4.1. Spinbillentő visszaszórás

Ebben a részben belátjuk, hogy ha a vizsgált szórópotenciál invariáns az időtükrözésre, azaz $[V, i\sigma_y C] = 0$, akkor spinbillentő visszaszórás nem történhet, azaz bármely φ_i és $\sigma \in \{\pm\}$ esetén

$$f_{-\sigma, \sigma}(\varphi_i + \pi, \varphi_i) = 0. \quad (2.43)$$

Ehhez az f szórási amplitúdó mátrix (2.16) definíciójából kell kiindulnunk. A definíció és az időtükrözési szimmetria (2.41) következményéből adódik, hogy a

$$g_{-\sigma, \sigma}(\varphi, \varphi_i) := \frac{1}{\sqrt{2\pi i k}} \sum_{j', j \in \mathbb{J}} e^{i(-j+\sigma/2)(\varphi-\pi/2)} (-1)^{j'+j+1} F_{jj'}^{(-\sigma, \sigma)} e^{-i(-j'-\sigma/2)(\varphi_i-\pi/2)} \quad (2.44)$$

függvényt bevezetve $f_{-\sigma, \sigma} = g_{-\sigma, \sigma}$ áll fenn. Márpedig ekkor

$$f_{-\sigma, \sigma}(\varphi_i + \pi, \varphi_i) = \frac{1}{2} [f_{-\sigma, \sigma}(\varphi_i + \pi, \varphi_i) + g_{-\sigma, \sigma}(\varphi_i + \pi, \varphi_i)], \quad (2.45)$$

és ebből az alakból már közvetlen számolással adódik az állítás.

Az ímént bizonyított tétel, azaz hogy időtükrözési szimmetria jelenlétében nulla valószínűségű a spinbillentő visszaszórás, belátható a szórásprobléma T -mátrix formalizmusának keretein belül is. A bizonyítást az 5.1. függelékben közöljük. A bizonyítás némileg szemléletesebb, mint az S -mátrix formalizmuson alapuló változat, és kiderül belőle, hogy a spinbillentő visszaszórás teljes hiányának oka az, hogy egy tetszőleges spinbillentő pálya és annak időtükrözött párja destruktívan interferál.

2.4.2. Ferde szórás

A szimmetriák az előző állításon túlmenően is leegyszerűsítik a szórást jellemző fizikai mennyiségeket. Tételezzük fel, hogy a V szórópotenciál egyszerű, azaz mindhárom fent tárgyalt szimmetria-operátorral kommutál. Továbbá az általánosság megszorítása nélkül vizsgáljunk olyan beeső nyalábokat, amelyek az x tengely mentén haladnak, azaz tekintsük a $\varphi_i = 0$ esetet a továbbiakban. Ekkor a szimmetriák következményeiből, azaz a (2.36), (2.41) és (2.42) képletekből levezethető, hogy az f szórási amplitúdó mátrix Pauli-felbontásában

szereplő együtthatók konkrét alakja

$$u_0(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi ik}} \sum_{j \in \mathbb{J}^+} F_{jj}^{(+,+)} \cos \left[\left(j - \frac{1}{2} \right) \varphi \right] + F_{jj}^{(-,-)} \cos \left[\left(j + \frac{1}{2} \right) \varphi \right], \quad (2.46)$$

$$u_1(\varphi) = \frac{2}{\sqrt{2\pi ik}} \sin(\varphi/2) \sum_{j \in \mathbb{J}^+} S_{jj}^{(-,+)} \cos(j\varphi), \quad (2.47)$$

$$u_2(\varphi) = -\frac{2}{\sqrt{2\pi ik}} \cos(\varphi/2) \sum_{j \in \mathbb{J}^+} S_{jj}^{(+,+)} \cos(j\varphi), \quad (2.48)$$

$$u_3(\varphi) = \frac{i}{\sqrt{2\pi ik}} \sum_{j \in \mathbb{J}^+} F_{jj}^{(+,+)} \sin \left[\left(j - \frac{1}{2} \right) \varphi \right] + F_{jj}^{(-,-)} \sin \left[\left(j + \frac{1}{2} \right) \varphi \right], \quad (2.49)$$

ahol $\mathbb{J}^+ := \{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots\}$. Hangsúlyozzuk, a fenti eredmények a $\varphi_i = 0$ esetben érvényesek.

A differenciális szórási hatáskeresztmetszetet a (2.24) képletben kifejeztük az u együtthatók segítségével. A (2.46)-(2.49) eredményekből közvetlenül leolvasható, hogy u_0 és u_2 páros függvénye, míg u_1 és u_3 páratlan függvénye a φ *szórási szögnek*. Az u_i mennyiségek ezen szimmetriatulajdonságaiból következik, hogy egyszerű szórópotenciálok esetén a differenciális szórási hatáskeresztmetszet (2.24) alakjában szereplő c és \mathbf{v} mennyiségekre igaz, hogy c és v_2 páros függvénye, míg v_1 és v_3 páratlan függvénye a φ szórási szögnek. Ebből viszont az következik, hogy ha a beeső nyaláb polarizációvektora nem párhuzamos \mathbf{e}_y -nal, akkor a szórópotenciál fenti három szimmetriája sem garantálja, hogy a differenciális szórási hatáskeresztmetszet szimmetrikus az előreszórás irányára, azaz felléphet a ferde szórás jelensége.

2.4.3. Polarizáció

A (2.28) képlet megadja a szórt nyaláb polarizációvektorának aszimptotikus alakját az S -mátrix és a beeső nyaláb polarizációjának függvényében. Ha a beeső nyaláb teljesen polarizálatlan, azaz $\mathbf{P}_0 = 0$, akkor a szórt nyaláb polarizációvektora $\varphi_i = 0$ esetén

$$\tilde{\mathbf{P}}^{(sc)}(\mathbf{r}, \mathbf{P}_0 = 0) = \frac{\mathbf{w}(\varphi)}{c(\varphi)}. \quad (2.50)$$

Egyszerű szórópotenciálokra az u_i mennyiségek szimmetriatulajdonságaiból következik, hogy a $\mathbf{w}(\varphi)$ vektor komponensei közül w_1 és w_3 páratlan, míg w_2 páros függvénye a φ szórási szögnek. A rendszer szimmetriái tehát nem követelik meg $\mathbf{w} = 0$ teljesülését, azaz a szórt nyaláb akkor is rendelkezhet véges polarizációval, ha a beeső nyaláb teljesen polarizálatlan.

2.4.4. Anomális Mott-szórás

Ahogy azt korábban már említettük, Mott-szórásnak nevezzük a (2.31) Hamilton-operátor által definiált háromdimenziós modellben lejátszódó szórási folyamatokat, ahol V egy tetszőleges centrális elektrosztatikus potenciál. A háromdimenziós Mott-szórás tulajdonságainak összefoglalását megtalálhatjuk például Mott és Massey könyvében [9]. Ebben a részben bemutatjuk a Mott-szórást leíró mennyiségek szimmetriatulajdonságait kimondottan azzal a céllal, hogy azokat összevethessük a Mott-szórás kétdimenziós változatának jellemzőivel.

Tekintsünk egy az x tengely irányába haladó tiszta spinállapotú síkhullámot: $\phi_\gamma(\mathbf{r}) = \gamma e^{ikx}$, ahol tehát $\gamma = (\gamma_+, \gamma_-) \in S_1(\mathbb{C}^2)$. A síkhullám szóródását leíró teljes hullámfüggvény a szórócentruntól távol

$$\psi_\gamma(\mathbf{r}) \sim \phi_\gamma(\mathbf{r}) + \frac{e^{ikr}}{r} f(\varphi, \theta) \gamma \quad (2.51)$$

alakú, ahol most φ és θ a háromdimenziós \mathbf{r} helyvektor szokásos gömbi polárkoordinátáit jelölik. Az f 2×2 -es komplex mátrixot itt is szórási amplitúdónak nevezzük. Belátható, hogy a rendszer szimmetriáinak következménye, hogy különböző θ értékekre $f(\varphi, \theta)$ értékei nem függetlenek, azaz $f(\varphi, 0)$ ismeretében bármely θ esetén $f(\varphi, \theta)$ megkonstruálható. Éppen ezért megtehetjük, hogy a továbbiakban csak az x - y szórási síkot tekintjük, azaz a szórási amplitúdót mint a φ síkbeli polárszög $f(\varphi)$ függvényét vizsgáljuk. Belátható, hogy az erre a szórási síkra elmondottak igazak bármely másik szórási síkra is.

A szórási sík rögzítése lehetővé teszi, hogy a háromdimenziós Mott-szórás tulajdonságait összehasonlítsuk annak kétdimenziós változatával. Mindkét általunk vizsgált fizikai mennyiség, a differenciális hatáskeresztmetszet és az aszimptotikus polarizáció a háromdimenziós esetben ugyanúgy fejezhető ki az f szórási amplitúdóval, mint a kétdimenziós esetben [(2.24) és (2.28) képletek a $\varphi_i = 0$ behelyettesítéssel]. [9] alapján állítjuk, hogy háromdimenziós Mott-szórás esetén a szórási amplitúdó $f(\varphi) = \sum_{i=0}^3 u_i(\varphi) \sigma_i$ Pauli-felbontásban szereplő u_i komplex értékű függvények közül u_0 páros függvénye a φ szögnek, míg $u_1 = u_2 = 0$, és u_3 páratlan függvénye φ -nek. Ezekből az összefüggésekből a differenciális hatáskeresztmetszetet és az aszimptotikus polarizációt kifejező c , \mathbf{v} , \mathbf{w} és \mathcal{M} mennyiségekre vonatkozó szimmetriarelációk következnek, amiket a 2.1. táblázatban foglaltunk össze.

Szintén a 2.1. táblázatban gyűjtöttük össze a kétdimenziós Mott-szórás szimmetriatulajdonságait, amelyeket a 2.4.2. és a 2.4.3. szakaszokban vezettünk le. A táblázatból világosan kiderül, hogy a háromdimenziós esetet jellemző szimmetriarelációk szigorúbbak, mint a

	c	v_1	v_2	v_3	w_1	w_2	w_3	\mathcal{M}_{11}	\mathcal{M}_{12}	\mathcal{M}_{13}	\mathcal{M}_{22}	\mathcal{M}_{23}	\mathcal{M}_{33}
3D	S	0	0	A	0	0	A	S	A	0	S	0	S
2D	S	A	S	A	A	S	A	S	A	S	S	A	S

2.1. táblázat. Reguláris (3D) és anomális (2D) Mott-szórás. A hatáskeresztmetszetet (2.24) és a szórt nyaláb aszimptotikus polarizációját (2.28) meghatározó mennyiségek szimmetriarelációi. S (A) jelöli azokat a mennyiségeket, amelyek a szórási szögnek páros (páratlan) függvényei. 0 jelöli azokat a mennyiségeket, amelyek a szimmetriák következtében azonosan nullák. \mathcal{M}_{ij} és M_{ji} ugyanazt a szimmetriatulajdonságot mutatja minden $i, j \in \{1, 2, 3\}$ esetén.

kétdimenziós esetre vonatkoznak. Például, három dimenzióban a kiszemelt szórási síkban ferde szórás csak akkor jön létre, ha a beeső nyaláb polarizációvektora merőleges a szórási síkra, hiszen láttuk, hogy $\sigma_{\text{diff}} = c + \mathbf{v} \cdot \mathbf{P}_0$. Ezzel szemben két dimenzióban v_1 nem feltétlenül tűnik el, és ezért ugyanezen azonosság miatt akkor is fellép a ferde szórás, ha a beeső nyaláb polarizációvektora a beeső nyaláb haladási irányával párhuzamos. Hasonló gondolatmenet mondható el az aszimptotikus polarizációval kapcsolatban: három dimenzióban a 2.1. táblázat alapján egy teljesen polarizálatlan beeső nyaláb esetén a szórt nyaláb polarizációja, $\tilde{\mathbf{P}}^{(\text{sc})} = \mathbf{w}/c$ mindig merőleges a szórási síkra, két dimenzióban azonban a rendszer szimmetriái nem jelentenek hasonló megkötést.

Mindezek a különbségek együttesen indokolják, hogy a fejezet címében az „anomális Mott-szórás” kifejezés szerepel. Ezek a megfontolások fontos szerepet játszhatnak a 2DEG-ben lejátszódó spinfüggő elektromos transzportfolyamatok elméletében, hiszen a makroszkopikus, mérhető mennyiségek szimmetriatulajdonságait általában a mikroszkopikus folyamatok, jelen esetben a szennyezőkön való szórási folyamat szimmetriatulajdonságai határozzák meg.

2.5. Born-közelítés

Az előző szakaszokban a differenciális hatáskeresztmetszetre és az aszimptotikus polarizációra kapott kifejezések teljesen egzaktak, nem tartalmaznak közelítést, feltéve, hogy az S -mátrix elemeit egzaktul ismerjük. Általános egyszerű szórópotenciál esetén az S -mátrix egzakt meghatározása persze sok esetben numerikus módszereket igényel. Analitikus, de közelítő eredményt kaphatunk viszont az S -mátrix elemeire, ha azokat a hullámfüggvény Born-sorának elsőrendű tagjából fejezzük ki, azaz ha a Born-közelítést alkalmazzuk [58].

(Born-közelítésen itt és a továbbiakban az első Born-közelítést értjük.)

Lényeges, hogy a Born-közelítésben kiszámolt fizikai mennyiségek szimmetriarelációi általában szigorúbbak, mint az egzakt módszerekkel kapott eredményekre vonatkozó relációk. Példaként említjük, hogy a háromdimenziós Mott szórás esetén a Born-közelítésben $\mathbf{v} = 0$ és $\mathbf{w} = 0$, azaz sem a ferde szórás jelensége, sem a szórócentrum polarizátorként való működése nem tanulmányozható az első Born-közelítésben (ld. még 2.2. táblázat) [9]. Ez persze lényeges nehezítést jelent az olyan spinfüggő transzportfolyamatok elméleti leírásában, amelyekben a szennyezőkőn történő spinfüggő szórás lényeges szerepet játszik.

Ebben a szakaszban megmutatjuk, hogy a Mott-szórás kétdimenziós változatára, azaz a (2.35) Hamilton-operátor által definiált szórásproblémára is igaz, hogy a Born-közelítésben számolt mennyiségek szimmetriarelációi szigorúbbak, mint az egzakt eredményekre vonatkozó relációk. Ugyanakkor belátjuk azt is, hogy a kétdimenziós esetben mind a ferde szórás, mind pedig a szórócentrum polarizátorként való működése megengedett már az első Born-közelítésben is.

A Born-közelítéshez eljuthatunk a Lippmann-Schwinger-egyenletből indulva [58]. Tetszőleges $H = H_0 + H_1$ Hamilton-operátorral jellemzett kvantumrendszerben definiálható a perturbálatlan rendszer retardált Green-operátora, $G_0^+(E) = (E + i\epsilon - H_0)^{-1}$. Legyen ϕ a perturbálatlan rendszer egy energia-sajátállapota, azaz $H_0\phi = E\phi$. Keressük azt a ψ hullámfüggvényt, amelyre $H\psi = E\psi$. A G_0^+ definíciójából következik, hogy ekkor a ψ állapotra fennáll a Lippmann-Schwinger-egyenlet, azaz

$$\psi = \phi + G_0^+(E)H_1\psi. \quad (2.52)$$

Az első Born-közelítés azt jelenti, hogy a Lippmann-Schwinger-egyenletből elhagyjuk a H_1 -ben legalább másodrendű tagokat:

$$\psi^{(\text{Born})} = \phi + G_0^+(E)H_1\phi. \quad (2.53)$$

Visszatérve a szórásproblémára, ott a (2.1) képletben definiált H_0 írja le a perturbálatlan rendszert, és a szórópotenciál adja H_1 -et. Perturbálatlan hullámfüggvénynek a (2.2) képletben definiált $\mathcal{J}_{j,\sigma}$ parciális hullámot tekintjük, ami egy befutó és egy kifutó hengerhullám összege. A perturbálatlan rendszer Green-függvénye, azaz a Green-operátor

helyreprezentációban [65]:

$$G_0^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) = \sigma_0 c k \sum_{m \in \mathbb{Z}} H_m^{(+)}(kr) J_m(kr') e^{im(\varphi - \varphi')}, \quad (2.54)$$

ahol $c = -im^*/(4\hbar^2 k)$ és \mathbb{Z} az egész számok halmazát jelöli. A Born-közelítésben adódó teljes hullámfüggvény ilyenkor (2.53) alapján

$$\psi^{(\text{Born})}(\mathbf{r}) = \mathcal{J}_{j,\sigma}(\mathbf{r}) + \int d^2 \mathbf{r}' G_0^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) [H_1 \mathcal{J}_{j,\sigma}](\mathbf{r}'), \quad (2.55)$$

ahol tehát (2.35) alapján

$$H_1(\mathbf{r}) = V_i(r) + \frac{i\lambda}{2} \left[\sigma_\varphi \{ \partial_r, W_z(r) \} - \frac{2}{r} \sigma_r W_z(r) \partial_\varphi \right] + i\lambda \frac{1}{r} \sigma_z W_r(r) \partial_\varphi. \quad (2.56)$$

A (2.55) egyenletben szereplő integrál hosszadalmas, de technikai nehézségektől mentes elvégzése után az így kiszámolt hullámfüggvényből (2.5) segítségével ki tudjuk fejteni az S -mátrix elemeit:

$$S_{j,j}^{(\sigma,\sigma)} = 1 - i\pi \frac{m^*}{\hbar^2} B_{j,\sigma} + i\sigma \left(j - \frac{\sigma}{2} \right) \pi \frac{\lambda m^*}{\hbar^2} C_{j,\sigma}, \quad (2.57)$$

$$S_{j,j}^{(-\sigma,\sigma)} = \frac{i\pi \lambda m^*}{2 \hbar^2} D_j. \quad (2.58)$$

Az S -mátrix többi eleme zérus, ahogy azt a rendszer forgásinvarianciája meg is követeli. A további definíciók:

$$B_{j,\sigma} = \int_0^\infty dr \, r \, V(r) J_{j-\sigma/2}^2(kr), \quad (2.59)$$

$$C_{j,\sigma} = \int_0^\infty dr \, W_r(r) J_{j-\sigma/2}^2(kr), \quad (2.60)$$

$$\begin{aligned} D_j &= -2j \int_0^\infty dr \, W_z(r) J_{j+1/2}(kr) J_{j-1/2}(kr) \\ &+ \int_0^\infty dr \, r \, W_z(r) [J_{j+1/2}(kr) \partial_r J_{j-1/2}(kr) - J_{j-1/2}(kr) \partial_r J_{j+1/2}(kr)]. \end{aligned} \quad (2.61)$$

Természetesen az így származtatott S -mátrix is teljesíti a (2.41), (2.36) és (2.42) szimmetriakövetelményeket.

Láttuk, hogy az S -mátrix elemeinek ismeretében rendre (2.24) és (2.28) fejezi ki a diffe-

	v_1	v_2	v_3	w_1	w_2	w_3
3D	0	0	0	0	0	0
2D	A	S	0	A	S	0

2.2. táblázat. Reguláris (3D) és anomális (2D) Mott-szórás az első Born-közelítésben. A hatáskeresztmetszetet (2.24) és a szórt nyaláb aszimptotikus polarizációját (2.28) meghatározó mennyiségek szimmetriarelációi. S (A) jelöli azokat a mennyiségeket, amelyek a szórási szögnek páros (páratlan) függvényei. 0 jelöli azokat a mennyiségeket, amelyek a szimmetriák következtében azonosan nullák.

renciális hatáskeresztmetszetet és az aszimptotikus polarizációt. Az S -mátrix imént kiszámolt közelítő alakjából meghatározható, hogy a fenti két fizikai mennyiség szempontjából lényeges \mathbf{v} és \mathbf{w} mennyiségek komponensei milyen szimmetriarelációkat követnek az első Born-közelítésben. Ezeket a tulajdonságokat foglaltuk össze a 2.2. táblázatban. A 2.1. táblázattal való összevetésből látszik, hogy mind a három- mind pedig a kétdimenziós Mott-szórás esetében igaz, hogy a Born-közelítésben a szórást leíró mennyiségek szimmetriarelációi szigorúbbak, mint az egzakt relációk. Másrészt pedig a 2.2. táblázatból kiderül, hogy míg a háromdimenziós esetben sem a ferde szórás jelensége, sem pedig a szórócentrum polarizátorként való működése nem jelenik meg az első Born-közelítésben, addig a kétdimenziós esetben mindkét effektus megvalósul.

2.6. Lokális Rasba-kölcsönhatás

Az eddigi szakaszokban nem foglalkoztunk azzal a kérdéssel, hogy adott szórópotenciál esetén hogyan lehet az S -mátrixot egzaktul meghatározni. Ebben az alfejezetben erre mutatunk példát. A 2DEG környezetében található szennyezőt leíró (2.35) Hamilton-operátor esetében az S -mátrix elemeit csak numerikus úton tudnánk egzaktul meghatározni. Ezért az alábbiakban egy olyan potenciált vizsgálunk, amelyre az egzakt S -mátrix analitikusan meghatározható, és amely ugyanabba a szimmetriaosztályba tartozik, mint a szennyezőt leíró spinfüggő potenciál (azaz a bevezett terminológia szerint „egyszerű”). Az alábbi potenciálon való szóródást szeretnénk leírni:

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{\hbar} [\sigma_x \{\alpha(r), p_y\} - \sigma_y \{\alpha(r), p_x\}], \quad (2.62)$$

ahol $\alpha(r) = \alpha_0 \Theta(R - r)$ és Θ a Heaviside-függvény. A rendszer teljes Hamilton-operátora tehát $H = H_0 + V = \mathbf{p}^2/(2m^*) + V$.

A fenti V potenciált az irodalomban lokális Rasba-kölcsönhatásnak is nevezik hiszen olyan rendszert ír le, amelyben az R sugarú körön belül véges, azon kívül pedig zérus erősségű az (1.4) Rasba-kölcsönhatás [66–70]. Az irodalomban két javaslatot is találunk arra vonatkozólag, hogy hogyan lehet lokális Rasba-kölcsönhatást valós rendszerekben létrehozni. Az egyik elképzelés szerint ehhez elegendő megfelelő alakú töltött kapuelektrodákat használni. A másik javaslat szerint úgy érhető el a Rasba-kölcsönhatás erősségének térbeli modulálása, ha a 2DEG-et határoló rétegeket térben inhomogén összetétel jellemzi; a Rasba-csatolás erőssége ugyanis nagyban függ a 2DEG-et határoló réteg anyagi minőségétől [26, 67].

Ahogy már említettük, V egyszerű potenciál, tehát a 2.4. szakaszban elmondottak mind teljesülnek V -re is. Ez a szimmetriarelációkon keresztül lényegesen lecsökkenti az S -mátrix meghatározandó elemeinek számát. A szórásprobléma megoldása során először az S -mátrixot számítjuk ki, ennek segítségével pedig mind az egzakt, mind pedig az aszimptotikus szórási állapotokat vizsgálni tudjuk. A továbbiakban a szórópotenciál erősségének jellemzésére az energia \times hossz dimenziójú α_0 paraméter helyett bevezetjük a hullámszám dimenziójú $k_{\text{so}} := m^* \alpha_0 / \hbar^2$ paramétert.

Az S -mátrix származtatásához tekintsük a $\mathcal{H}_{j\sigma}^{(-)}$ befutó hengerhullám szóródását leíró hullámfüggvényt:

$$\psi_{j\sigma} = \mathcal{H}_{j\sigma}^{(-)} + S_j^{(+,\sigma)} \mathcal{H}_{j,+}^{(+)} + S_j^{(-,\sigma)} \mathcal{H}_{j,-}^{(+)}, \quad (2.63)$$

ahol $S_j^{(\sigma'\sigma)} := S_{jj}^{(\sigma'\sigma)}$, és a fenti összefüggés a korábbi (2.5) és (2.36) eredmények alapján adódik, és csak olyan \mathbf{r} pontokban igaz, ahol $r > R$. Mivel a teljes $H = H_0 + V$ Hamilton-operátor kommutál a teljes impulzuszmomentum J_z operátorával, ezért az impulzuszmomentum megmarad a szórás folyamán, azaz az $r < R$ tartományban egy j impulzuszmomentumú reguláris függvényt kell illeszteni a fenti, $r > R$ tartományban érvényes hullámfüggvényhez. A Schrödinger egyenletnek két ilyen megoldása van az $r < R$ tartományban:

$$\mathfrak{J}_{j\tau}(\mathbf{r}) := \begin{pmatrix} \tau J_{j-1/2}(k_r r) e^{-i\varphi/2} \\ J_{j+1/2}(k_r r) e^{i\varphi/2} \end{pmatrix} e^{ij\varphi}, \quad (2.64)$$

ahol $\tau \in \{\pm\}$ és $k_r = \sqrt{k^2 + k_{\text{so}}^2} - \tau k_{\text{so}}$. Megjegyezzük, hogy míg az R -en kívüli $\mathcal{Z}_{j\sigma}$ parciális hullámokra igaz, hogy $\sigma_z \mathcal{Z}_{j\sigma} = \sigma \mathcal{Z}_{j\sigma}$ (azaz a σ index a z -irányú spinvetületre utal), addig az R -en belüli $\mathfrak{J}_{j\tau}$ parciális hullámokra hasonló összefüggés nem áll fenn. Ezért használjuk a \mathfrak{J} indexeként a σ helyett a τ jelet. Tehát a $\psi_{j\sigma}$ hullámfüggvényhez tartozó hullámfüggvény

az $r < R$ tartományban

$$\psi_{j\sigma}^{(R)} = \sum_{\tau \in \{\pm\}} A_j^{(\tau\sigma)} \mathfrak{J}_{j\tau}, \quad (2.65)$$

ahol az $A_j^{(\tau\sigma)}$ együtthatók egyelőre ismeretlenek, és értéküket az R sugarú köríven érvényes határfeltételek segítségével lehet meghatározni.

A határfeltételeket a következő két követelményből kell származtatnunk: (1) a hullámfüggvénynek minden pontban folytonosnak kell lennie; és (2) az áramsűrűségnek minden pontban folytonosnak kell lennie. Megmutatható, hogy a fenti $\psi_{j\sigma}$ és $\psi_{j\sigma}^{(R)}$ ansatzokat használva az R sugarú körív minden pontjában teljesül a fenti két követelmény, ha

$$\psi_{j\sigma}(R, 0) = \psi_{j\sigma}^{(R)}(R, 0), \quad (2.66)$$

$$[\partial_r \psi_{j\sigma}](R, 0) = [(\partial_r - ik_{\text{so}} \sigma_y) \psi_{j\sigma}^{(R)}](R, 0) \quad (2.67)$$

teljesül. Ez a két határfeltétel az $s_j^{(\sigma)} := (S_j^{(+,\sigma)}, S_j^{(-,\sigma)}, A_j^{(+,\sigma)}, A_j^{(-,\sigma)})$ ismeretlen vektorra nézve egy $M_j s_j^{(\sigma)} = b_j^{(\sigma)}$ alakú inhomogén lineáris egyenletrendszerrel jelent, ahol

$$M_j := \begin{pmatrix} H_{j-\frac{1}{2}}^{(+)}(X) & 0 & -J_{j-\frac{1}{2}}(X_+) & J_{j-\frac{1}{2}}(X_-) \\ 0 & H_{j+\frac{1}{2}}^{(+)}(X) & -J_{j+\frac{1}{2}}(X_+) & -J_{j+\frac{1}{2}}(X_-) \\ X \left[H_{j-\frac{1}{2}}^{(+)} \right]'(X) & 0 & X_{\text{so}} J_{j+\frac{1}{2}}(X_+) - X_+ \left[J_{j-\frac{1}{2}} \right]'(X_+) & X_{\text{so}} J_{j+\frac{1}{2}}(X_-) + X_- \left[J_{j-\frac{1}{2}} \right]'(X_-) \\ 0 & X \left[H_{j+\frac{1}{2}}^{(+)} \right]'(X) & -X_{\text{so}} J_{j-\frac{1}{2}}(X_+) - X_+ \left[J_{j+\frac{1}{2}} \right]'(X_+) & X_{\text{so}} J_{j-\frac{1}{2}}(X_-) - X_- \left[J_{j+\frac{1}{2}} \right]'(X_-) \end{pmatrix} \quad (2.68)$$

$$b_j^{(+)} := \begin{pmatrix} -H_{j-\frac{1}{2}}^{(-)}(X) \\ 0 \\ -X \left[H_{j-\frac{1}{2}}^{(-)} \right]'(X) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.69)$$

$$b_j^{(-)} := \begin{pmatrix} 0 \\ -H_{j+\frac{1}{2}}^{(-)}(X) \\ 0 \\ -X \left[H_{j+\frac{1}{2}}^{(-)} \right]'(X) \end{pmatrix}, \quad (2.70)$$

ahol $X := kR$, $X_{\pm} := k_{\pm}R$, $X_{\text{so}} := k_{\text{so}}R$ és a vessző ($'$) a deriválást jelöli.

A lineáris egyenletrendszer elemi úton megoldható, a megoldás pedig megadja mind az S -mátrix elemeit, mind pedig az $A_j^{(\tau\sigma)}$ együtthatókat. A megoldásként kapott S -mátrix elemei természetesen kielégítik a (2.36), (2.41) és (2.42) általános szimmetria-relációkat.

Ha meghatároztuk az S -mátrix elemeit és az $A_j^{(\tau\sigma)}$ együttthatókat, akkor a $\phi_{\varphi_i,\sigma}$ síkhullám szóródását leíró teljes hullámfüggvény az $r > R$ tartományban $\psi_{\varphi_i,\sigma} = \phi_{\varphi_i,\sigma} + \psi_{\varphi_i,\sigma}^{(\text{sc})}$, ahol a $\psi_{\varphi_i,\sigma}^{(\text{sc})}$ szórt hullámot a (2.6) egyenlet alapján számíthatjuk ki. Egyszerű megmutatni, hogy a szórási folyamatot leíró teljes hullámfüggvény folytonosságát és az abból származtatott áramsűrűség folytonosságát biztosítandó az $r < R$ tartományban a hullámfüggvény az alábbi alakot ölti:

$$\psi_{\varphi_i,\sigma}^{(R)} := \sum_{j \in \mathbb{J}} i^{j-\sigma/2} \psi_{j\sigma}^{(R)} e^{-i(j-\sigma/2)\varphi_i}. \quad (2.71)$$

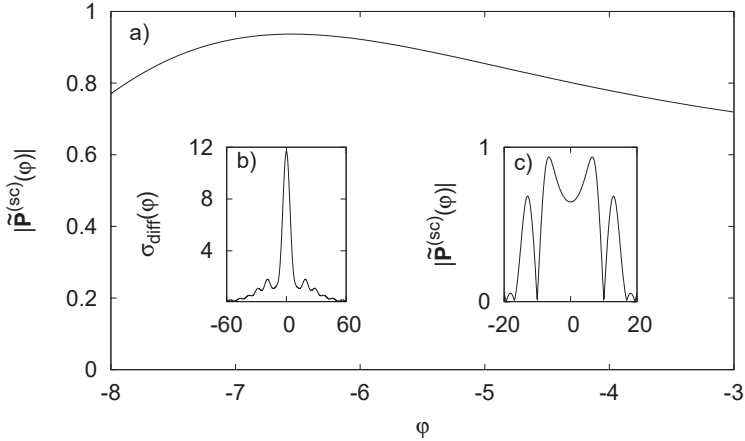
A $\psi_{\varphi_i,\sigma}$ és $\psi_{\varphi_i,\sigma}^{(R)}$ hullámfüggvények „összeillesztésével” kapott függvény szolgáltatja tehát a szórásprobléma megoldását. A szórásproblémára vonatkozó aszimptotikus fizikai mennyiségek – a hatáskeresztmetszet és a polarizáció – a (2.24) és (2.28) képletekből az S -mátrix ismeretében minden nehézség nélkül kiszámíthatók.

2.6.1. Eredmények

Mindenekelőtt megemlíttük, hogy a szórást jellemző aszimptotikus mennyiségeket definiáló c , \mathbf{v} , \mathbf{w} és \mathcal{M} mennyiségek eredményeinkben pontosan ugyanazokat a szimmetriatulajdonságokat mutatják, mint amiket a szimmetria-megfontolások alapján a 2.1. táblázatban összefoglaltunk. Ez azt jelenti, hogy a rendszernek nincs olyan, általunk nem vizsgált szimmetriatulajdonsága, ami további megszorításokat jelentene a fenti mennyiségre vonatkozólag.

A 2.1. ábra demonstrálja, hogy a szórási folyamatot jellemző paraméterek – az E szórási energia, a lokális Rasba-kölcsönhatás k_{so} erőssége és R hatósugara – megfelelő megválasztása mellett a szórócentrum jó polarizátorként működik. Az ábra egy teljesen polarizálatlan beeső nyaláb esetére vonatkozik. Ahogy azt a 2.1. a) ábra mutatja, a -8 és -3 fok közötti szórási tartományban a szórt nyaláb polarizációvektorának nagysága csaknem egységnyi. A 2.1. c) ábrán ugyanezt a mennyiséget ábrázoljuk a -20 és 20 fok közötti tartományban. Látható, hogy a polarizáció itt is egységnyi nagyságrendű. A 2.1. b) ábrán a differenciális hatáskeresztmetszetet ábrázoltuk. Ebből kitűnik, hogy a szórási hatáskeresztmetszet ebben az előreszóráshoz közeli tartományban a legnagyobb. Ez éppen az ideális eset, ha a rendszert tényleg polarizátorként akarjuk használni: ha ugyanis egy bizonyos szögtartományban kicsi a hatáskeresztmetszet, akkor hiába magas ott a polarizáció, hiszen az elektronok többsége nem abban az irányban hagyja el a szórócentrumot.

A polarizálás képessége persze nem csak a szórócentrumtól aszimptotikusan távol érvényesül. Véges polarizációt kaphatunk a szórócentrum közelében is, ezt demonstráljuk

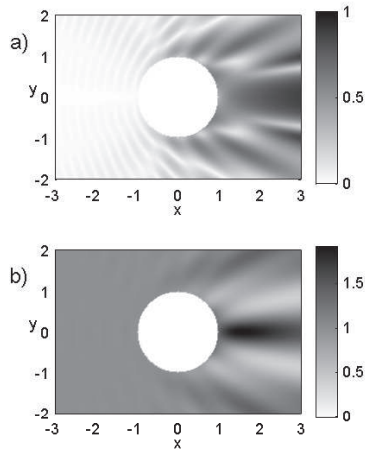


2.1. ábra. a) és c) Az aszimptotikus polarizációvektor $|\tilde{\mathbf{P}}^{(sc)}|$ nagysága és b) a σ_{diff} differenciális hatáskeresztmetszet a φ fokokban mért szórási szög függvényében. A σ_{diff} szórási hatáskeresztmetszet egysége R . A beeső nyaláb teljesen polarizálatlan, $\mathbf{P}_0 = 0$. További paraméterek: $kR = 20.0$, $k_{\text{so}}R = 4.0$ és $\varphi_i = 0$.

a 2.2. ábrán, amely szintén egy olyan esetre vonatkozik, ahol a beeső nyaláb teljesen polarizálatlan. A 2.2. a) ábra a teljes nyalábra vonatkozó polarizációt (a polarizációvektor nagyságát) mint a hely függvényét mutatja. Jól látható, hogy az előreszórás irányában a polarizáció egységnyi nagyságrendű. A 2.2. b) ábra a részecskesűrűség helyfüggését ábrázolja. Láthatjuk, hogy az előreszórás irányában, a sötétebb tartományban a részecskesűrűség magasabb, mint a síkhullám részecskesűrűsége. Ez megint éppen az ideális eset: a szórócentrum egyszerre polarizálja a nyalábot és „fókuszálja” azt a tér egy bizonyos tartományába.

2.7. Összefoglalás

Dolgozatunk ezen fejezetében a háromdimenziós Mott-szórás elméletét követve kidolgoztuk a kétdimenziós elektronok spinfüggő szórócentrumokon való szóródásának elméletét. A formalizmus alapvető matematikai eszköze a szórócentrumot jellemző S -mátrix. A fejezet



2.2. ábra. a) A teljes nyaláb polarizációjának helyfüggése x tengely mentén haladó polarizálatlan beeső nyaláb esetén. b) A teljes nyaláb részecskesűrűségének és a beeső nyaláb térben homogén részecskesűrűségének aránya, mint a pozíció függvénye. Az ábrákon a kör alakú fehér tartomány jelzi a lokális Rabi-kölcsönhatás tartományát. A koordináták egysége R . További paraméterek: $kR = 7.0$ és $k_{so}R = 1.0$.

további részeiben előforduló fizikai mennyiségeket, a teljes hullámfüggvényt, a differenciális hatáskeresztmetszetet és az aszimptotikus polarizációt kifejeztük az S -mátrix függvényeként. A szórásprobléma S -mátrix formalizmusának bemutatása után kiszámoltuk, hogy a 2DEG elektronjai milyen spinfüggő potenciáletteret éreznek, ha a kvantumgödör közelében egy töltött szennyező van jelen.

Ezt követően megvizsgáltuk, hogy a szennyező által keltett potenciál szimmetriái milyen szimmetriarelációkat vonnak maguk után a differenciális hatáskeresztmetszetre és az aszimptotikus polarizációra vonatkozóan. Először beláttuk, hogy ha a szórócentrum invariáns az időtükrözésre, akkor a spinbillentő visszaszórás valószínűsége nulla. Ezt követően megmutattuk, hogy a háromdimenziós Mott-szórás során fellépő két jellegzetes effektus, a ferde szórás és a polarizálatlan beeső nyaláb polarizálása a kétdimenziós spinfüggő szórás esetén is megjelenik, még akkor is, ha a szórócentrum invariáns mind az időtükrözésre ($i\sigma_y C$), mind a forgatásra (J_z), mind pedig a kombinált tértükrözés-spinforgatás műveletre ($\sigma_y P_x$). Megmutattuk azt is, hogy a kétdimenziós esetben ezeket a mennyiségeket leíró szimmetriarelációk megengedőbbek, mint a háromdimenziós esetben. A szimmetriarelációkat a 2.1. táblázatban összegeztünk.

Meghatároztuk az S -mátrixot az első Born-közelítésben. Azt találtuk, hogy az S -mátrixból származtatott mennyiségek, a hatáskeresztmetszet és az aszimptotikus polarizáció szimmetriarelációi szigorúbbak a Born-közelítésben, mint az egzakt esetben. Lényeges eltérés a háromdimenziós Mott-szóráshoz képest, hogy a kétdimenziós esetben a ferde szórás jelensége és a szórócentrum polarizáló tulajdonsága már az első Born-közelítésben is megjelenik. Ez a tulajdonság technikailag megkönnyítheti a spinfüggő szórási folyamatokkal kapcsolatos kétdimenziós elektromos transzportjelenségek elméleti vizsgálatát.

A fejezet utolsó részében egy konkrét rendszeren, a lokális Rasba-kölcsönhatás példáján demonstráltuk a formalizmus és a szimmetriaanalízis működését. Ezen túlmenően pedig bemutatottuk, hogy ez a rendszer a paraméterek megfelelő megválasztása esetén jó spinpolarizátorként működhet, azaz lehetőséget adhat arra, hogy mágneses anyagok és külső mágneses terek használata nélkül polarizálatlan elektronnyalábot részben vagy egészben polarizált nyalábbá alakítson. Eredményeink alapján szolgálhatnak spin-polarizátorként használható elektron-optikai rendszerek realizistikus modellezéséhez.

3. fejezet

Potenciálszórás Rasba-elektrongázban

3.1. Bevezetés

Ebben a fejezetben a kétdimenziós spinfüggő szórásprobléma S -mátrix formalizmusát általánosítjuk a dolgozat Bevezetésében már említett Rasba-modell esetére. Emlékeztetünk, hogy az (1.4) Rasba-kölcsönhatás egy, a rendszerben homogén módon jelen lévő, a szennyezőktől független spin-pálya-kölcsönhatás, ami a 2DEG-et tartalmazó félvezető heterostruktúra aszimmetriájának következménye. A formalizmus ismertetése után az előző fejezethez hasonlóan itt is megvizsgáljuk a 2DEG közelében elhelyezkedő töltött szennyezőkön történő szórási folyamatok általános szimmetriatulajdonságait. Az elmélet alkalmazásaképpen a szimmetriákra alapozva kiszámoljuk, hogy a 2DEG-en átfolyó gyenge egyenáram milyen spin-eloszlást indukál a szennyezők környezetében.

A fejezet témájához kapcsolódó eredményeket közöltünk a [71] publikációban.

3.2. Az S -mátrix formalizmus

3.2.1. Homogén rendszer

A Rasba-kölcsönhatás jelenlétében a homogén rendszer Hamilton-operátora:

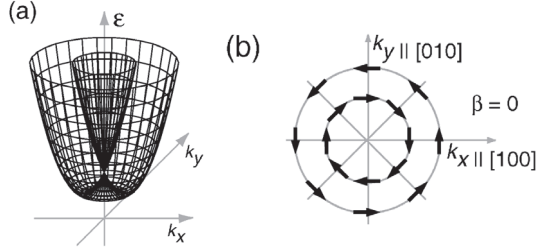
$$H_0 = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m^*} + \frac{\alpha}{\hbar} (\sigma_x p_y - \sigma_y p_x). \quad (3.1)$$

Itt az α paraméter jellemzi a Rasba-csatolás erősségét, értéke az eddigi mérések szerint legfeljebb néhányszor 10^{-11} eV m [25, 26, 32]. Lényeges észrevétel, hogy H_0 második tagja, az ún. Rasba-tag átírható egy olyan, a Zeeman-taghoz hasonló alakba, melyben a mágneses tér szerepét játszó mennyiség függ az impulzustól:

$$H_0 = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m^*} + \frac{\alpha}{\hbar} \begin{pmatrix} p_y \\ -p_x \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (3.2)$$

Látható, hogy a $\mathbf{B}_{\text{eff}}(\mathbf{p}) = \frac{\alpha}{\hbar}(p_y, -p_x, 0)$ effektív mágneses tér mindig a 2DEG síkjában fekszik, és ebben a síkban +90 fokkal van elforgatva az impulzusvektor irányához képest. A későbbiekben látni fogjuk, hogy ebben a rendszerben a hullámfüggvények spin-dinamikája teljes egészében megérthető a fent definiált effektív mágneses tér fogalmának segítségével.

Ebben a fejezetben mindvégig a H_0 pozitív sajátértékeihez tartozó sajátfüggvényeit



3.1. ábra. A Rasba-féle Hamilton-operátorhoz tartozó diszperziós reláció (a) és a \mathbf{k} -térbeli spin-mintázat (b) [31].

fogjuk vizsgálni. A továbbiakban a Rasba-tag erősségét jellemző α mennyiség helyett a $k_{\text{so}} := \alpha m^* / \hbar^2$ hullámszám dimenziójú paramétert fogjuk használni, ez valós rendszerekben legfeljebb 0.01 nm^{-1} nagyságrendű lehet (vö. 1.3. ábra). A rendszer Hilbert-terében definiáljuk a $\phi_{E, \varphi_i, \tau}(\mathbf{r}) := \eta_\tau(\varphi_i) e^{ik_\tau r \cos(\varphi - \varphi_i)}$ alakú, φ_i irányban haladó síkhullámokat, ahol $E > 0$, $\tau \in \{\pm\}$, $k_\tau := \sqrt{2m^*E/\hbar^2 + k_{\text{so}}^2} - \tau k_{\text{so}}$, és $\varphi_i \in [0, 2\pi[$, valamint

$$\eta_\tau(\varphi_i) := \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \tau i e^{-i\varphi_i/2} \\ e^{i\varphi_i/2} \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

Belátható, hogy $H_0 \phi_{E, \varphi_i, \tau} = E \phi_{E, \varphi_i, \tau}$. A hullámszámvektor és az energia közötti fenti összefüggés invertálásával kapható

$$\varepsilon_{\mathbf{k}, \tau} = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k^2 + \tau 2k k_{\text{so}}) \quad (3.4)$$

függvényt, azaz a síkhullámok diszperziós relációját mutatja a 3.1. (a) ábra. Egyszerű tény továbbá, hogy bármely $\phi_{E, \varphi_i, \tau}$ állapotban a spin-vektor a sík tetszőleges \mathbf{r} pontjában

$$[\phi_{E, \varphi_i, \tau}(\mathbf{r})]^\dagger \boldsymbol{\sigma} \phi_{E, \varphi_i, \tau}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \cos(\varphi_i - \tau\pi/2) \\ \sin(\varphi_i - \tau\pi/2) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

azaz független \mathbf{r} -től, és a síkhullám φ_i haladási irányához képest jól meghatározott, a τ kvantumszámtól függő irányba mutat. Emiatt alkalmazzuk az irodalomban elterjedt elnevezést, és

a τ kvantumszámot a továbbiakban *helicitás-kvantumszámnak*, a fenti $\phi_{E,\varphi_i,\tau}$ síkhullámokat pedig *helicitás-sajátállapotoknak* nevezzük. Az impulzus és a spin relatív orientációját illusztráljuk a 3.1. (b) ábrán. A spinek ilyen viselkedése ebben a rendszerben teljesen konzisztens azzal a ténnyel, hogy a H_0 Hamilton-operátorban szereplő Rasba-tag lényegében egy impulzusfüggő effektív mágneses tér hatását írja le. A (3.5) eredmény alapján ugyanis világos, hogy az energiasajátállapotok spinje mindkét lehetséges $\tau \in \{\pm\}$ kvantumszám esetén párhuzamos az effektív mágneses térrel.

További állítás, hogy $E > 0$ esetén a

$$\mathfrak{Z}_{E,j,\tau}(\mathbf{r}) := \sqrt{\frac{k_\tau}{2k}} \begin{pmatrix} \tau Z_{j-1/2}(k_\tau r) e^{-i\varphi/2} \\ Z_{j+1/2}(k_\tau r) e^{i\varphi/2} \end{pmatrix} e^{ij\varphi} \quad (3.6)$$

hullámfüggvényekre – ahol $k := \sqrt{2m^*E/\hbar^2 + k_{\text{so}}^2}$, $j \in \mathbb{J}$ (j félegész), $\tau \in \{\pm\}$ és $Z \in \{J, Y, H^{(+)}, H^{(-)}\}$ – igaz, hogy $H_0 \mathfrak{Z}_{Ej\tau} = E \mathfrak{Z}_{Ej\tau}$. A továbbiakban rendre \mathfrak{J} , \mathfrak{Y} , $\mathfrak{H}^{(+)}$ és $\mathfrak{H}^{(-)}$ jelöli azokat a hullámfüggvényeket, amelyeket a (3.6) képletből úgy nyerünk, hogy Z -t J -re, Y -ra, $H^{(+)}$ -ra és $H^{(-)}$ -ra cseréljük le. Az előző fejezethez hasonlóan itt is *hengerhullámoknak* nevezzük a fenti $\mathfrak{Z}_{Ej\tau}$ hullámfüggvényeket. Szintén hasonlóság, hogy a $\mathfrak{H}_{Ej\tau}^{(+)}$ hullámfüggvényeket *kifutó*, a $\mathfrak{H}_{Ej\tau}^{(-)}$ hullámfüggvényeket pedig *befutó* hengerhullámoknak hívjuk. Az elnevezést az indokolja, hogy az általuk definiált radiális áramsűrűség

$$j_r(\mathbf{r}) := \mathbf{e}_r(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) = \mathbf{e}_r(\mathbf{r}) \cdot \text{Re} \left\{ \left[\mathfrak{H}_{Ej\tau}^{(\pm)}(\mathbf{r}) \right]^\dagger \mathbf{v} \mathfrak{H}_{Ej\tau}^{(\pm)}(\mathbf{r}) \right\} = \pm \frac{2}{\pi k} \frac{\hbar k}{m^*} \frac{1}{r}, \quad (3.7)$$

ahol

$$\mathbf{v} = i\hbar^{-1} [H_0, \mathbf{r}] = \frac{\mathbf{p}}{m^*} + \frac{\hbar k_{\text{so}}}{m^*} (\mathbf{e}_z \times \boldsymbol{\sigma}). \quad (3.8)$$

Természetesen itt is igaz az a megjegyzés, hogy rögzített E , j és τ esetén az a négy különböző $\mathfrak{Z}_{Ej\tau}$ hengerhullám halmazának bármely kételemű részhalma lineárisan független, és bármely háromelemű részhalma lineárisan összefüggő.

A $\phi_{E\varphi_i\tau}$ síkhullám „parciális felbontása”, azaz hengerhullámokkal való előállítása [56]

$$\phi_{E\varphi_i\tau} = \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathbb{J}} i^{j+1/2} \sqrt{\frac{k}{k_\tau}} \left[\mathfrak{H}_{Ej\tau}^{(+)} + \mathfrak{H}_{Ej\tau}^{(-)} \right] e^{-ij\varphi_i}. \quad (3.9)$$

3.2.2. Az S -mátrix

Vizsgáljuk a Rasba rendszer elektronjainak rugalmas szóródását egy hermitikus, véges R hatótávolságú V szórópotenciálon. V lehet akár spinfüggő is. Az elektronok dinamikáját leíró Hamilton-operátor a szórópotenciál jelenlétében $H = H_0 + V$.

Az egyszerűség kedvéért a továbbiakban az előző szakaszban definiált sík- és hengerhullámok jelölésében elhagyjuk az energiára utaló E indexet. A szórásprobléma matematikai megfogalmazása a következő: adott $E > 0$ energiájú $\phi_{\varphi_i\tau}$ síkhullám esetén keressük azt a $\psi_{\varphi_i\tau}$ reguláris hullámfüggvényt (az ún. *teljes hullámot*), melyre teljesül, hogy (1) $\psi_{\varphi_i\tau}$ reguláris, (2) $H\psi_{\varphi_i\tau} = E\psi_{\varphi_i\tau}$ és (3) a $\psi_{\varphi_i\tau}^{(\text{sc})} := \psi_{\varphi_i\tau} - \phi_{\varphi_i\tau}$ ún. *szórt hullám* az R sugarú körön kívül előáll kifutó hengerhullámok soraként.

A teljes hullám megkonstruálása felé tett első lépésként vizsgáljuk a $\mathfrak{H}_{j\tau}^{(-)}$ befutó hengerhullám szóródását a V szórópotenciálon. Rugalmas szóródásról lévén szó, a befutó hengerhullám vele azonos energiájú kifutó hengerhullámként szóródhat, ezért a szóródást leíró hullámfüggvény az $r > R$ tartományban

$$\psi_{j\tau}(\mathbf{r}) = \mathfrak{H}_{j\tau}^{(-)}(\mathbf{r}) + \sum_{\tau' \in \{\pm\}} \sum_{j' \in \mathbb{J}} S_{j'j}^{(\tau'\tau)} \mathfrak{H}_{j'\tau'}^{(+)}(\mathbf{r}) \quad (3.10)$$

alakú. Adott E energia és V szórópotenciál esetén az $S_{j'j}^{(\tau'\tau)}$ együtthatórendszer egyértelműen meghatározott azon követelmény által, hogy $\psi_{j\tau}$ -t ki kell tudni terjeszteni az $r < R$ tartományra úgy, hogy a kiterjesztés eredménye E energiájú reguláris sajátfüggvénye legyen H -nak. Az $S_{j'j}^{(\tau'\tau)}$ együtthatórendszer elemeiből alkotott mátrixot nevezzük a továbbiakban az E energiához és a V szórópotenciálhoz tartozó S -mátrixnak.

A (3.9) parciális felbontás és az S -mátrix (3.10) definíciójának következménye, hogy a szórásprobléma megoldása, a teljes hullám az $r > R$ tartományban a

$$\psi_{\varphi_i\tau}^{(\text{sc})}(\mathbf{r}) := \frac{1}{2} \sqrt{\frac{k}{k_\tau}} \sum_{\tau' \in \{\pm\}} \sum_{j, j' \in \mathbb{J}} i^{j+1/2} F_{j'j}^{(\tau'\tau)} \mathfrak{H}_{j'\tau'}^{(+)}(\mathbf{r}) e^{-ij\varphi_i} \quad (3.11)$$

választással előáll $\psi_{\varphi_i\tau} := \phi_{\varphi_i\tau} + \psi_{\varphi_i\tau}^{(\text{sc})}$ alakban, ahol $F_{j'j}^{(\tau'\tau)} := S_{j'j}^{(\tau'\tau)} - \delta_{j'j} \delta_{\tau'\tau}$.

Szeretnénk kiterjeszteni a szórásproblémát olyan síkhullámokra, amelyek adott E energiával és φ_i haladási iránnyal rendelkeznek, de nem feltétlenül helicitás-sajátállapotok. Ezek általános alakja

$$\phi_{\varphi_i\gamma} = \sum_{\tau \in \{\pm\}} \gamma_\tau \phi_{\varphi_i\tau} = I_{\varphi_i}(\mathbf{r}) \gamma, \quad (3.12)$$

ahol $\gamma = (\gamma_+, \gamma_-)^T \in S_1(\mathbb{C}^2)$ és az $I_{\varphi_i}(\mathbf{r}) := (\phi_{\varphi_i,+}(\mathbf{r}), \phi_{\varphi_i,-}(\mathbf{r}))$ mennyiség 2×2 -es komplex mátrix. A Schrödinger-egyenlet linearitásának következménye, hogy egy ilyen síkhullámhoz tartozó szórt hullám az $r > R$ tartományban

$$\psi_{\varphi_i\gamma}^{(\text{sc})} = \sum_{\tau \in \{\pm\}} \gamma_\tau \psi_{\varphi_i\tau}^{(\text{sc})}. \quad (3.13)$$

3.2.3. Sűrűségmátrix-formalizmus

Ezidáig a vizsgált kvantummechanikai rendszer tiszta állapotaival foglalkoztunk. Az alábbiakban kiterjesztjük a szórásproblémát olyan kevert állapotú síkhullámokra, amelyek energiája és haladási iránya ugyan jól meghatározott, de spinállapotuk valamilyen statisztikus keveréke a lehetséges tiszta spinállapotoknak. Ettől a szakasztól fogva rendszeresen újra alkalmazzuk majd a 2.2.3. szakaszban bevezetett fogalmakat.

Tekintsük az adott E energiájú, φ_i irányba haladó tiszta állapotú síkhullámok valamilyen statisztikus keverékét: legyen $\{\gamma^{(m)} \in S_1(\mathbb{C}^2)\}_{m=1,\dots,n}$, $\{w_m \in \mathbb{R}^+\}_{m=1,\dots,n}$ és $\sum_{m=1}^n w_m = 1$. Vizsgáljuk tehát a következő állapotot:

$$\mathcal{R}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{m=1}^n w_m \phi_{\varphi_i\gamma^{(m)}}(\mathbf{r}) [\phi_{\varphi_i\gamma^{(m)}}(\mathbf{r}')]^\dagger. \quad (3.14)$$

A (3.12) eredményből következik, hogy

$$\mathcal{R}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = I_{\varphi_i}(\mathbf{r}) \rho_0 [I_{\varphi_i}(\mathbf{r}')]^\dagger, \quad (3.15)$$

ahol a $\rho_0 := \sum_{m=1}^n w_m \gamma^{(m)} [\gamma^{(m)}]^\dagger$ egy qubit-sűrűségmátrix. Tehát bármely, adott E energiájú és φ_i haladási irányú kevert állapotú síkhullám jellemezhető egy ρ_0 qubit-sűrűségmátrixszal. A továbbiakban a (3.15) állapotot $\mathcal{R}_{\varphi_i, \rho_0}$ -al jelöljük és *beeső nyalábnak* nevezzük. A ρ_0 qubit-sűrűségmátrixot a továbbiakban a *beeső nyaláb helicitás-sűrűségmátrixának* nevezzük. Az elnevezést az indokolja, hogy ha $\rho_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, akkor a beeső nyaláb éppen a „+” helicitás-quantumszámhoz tartozó $\phi_{\varphi_i,+}(\mathbf{r}) [\phi_{\varphi_i,+}(\mathbf{r}')]^\dagger$ tiszta állapot, ha pedig $\rho_0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, akkor a beeső nyaláb éppen a „-” helicitás-quantumszámhoz tartozó $\phi_{\varphi_i,-}(\mathbf{r}) [\phi_{\varphi_i,-}(\mathbf{r}')]^\dagger$ tiszta állapot. Érdemes definiálni a beeső nyaláb *helicitás-vektorát* a $\mathbf{H}_0 := \mathbf{q}(\rho_0) := \text{Tr}(\rho_0 \boldsymbol{\sigma})$ módon. Mivel $\mathbf{q} : Q \rightarrow B_1(\mathbb{R}^3)$ bijekció (itt Q a qubit-

sűrűségmátrixok halmaza és $B_1(\mathbb{R}^3)$ a háromdimenziós lezárt egységgömb), ezért a beeső nyaláb jellemezhető a ρ_0 helicitás-sűrűségmátrixa helyett a \mathbf{H}_0 helicitás-vektorával. Ilyenkor az $\mathcal{R}_{\varphi_i, \mathbf{H}_0}$ jelölést használjuk a beeső nyalábra. A jól definiált $\tau \in \{\pm 1\}$ helicitással rendelkező tiszta állapot helicitásvektora éppen $\mathbf{H}_0 = (0, 0, \tau)$. Az ettől eltérő $\mathbf{H}_0 \in B_1(\mathbb{R}^3)$ helicitásvektorral jellemzett állapotok nem helicitás-sajátállapotok.

Nem triviális kérdés, hogy mi az $\mathcal{R}_{\varphi_i, \mathbf{H}_0}$ beeső nyaláb $\mathbf{P}^{(\text{in})}(\mathbf{r})$ polarizációvektora a sík valamely \mathbf{r} pontjában. A számolás részleteinek közlése nélkül állítjuk, hogy

$$\mathbf{P}^{(\text{in})}(\mathbf{r}) = \mathcal{I}_{\varphi_i}(0) \mathcal{K}(r \cos(\varphi - \varphi_i)) \mathbf{H}_0, \quad (3.16)$$

ahol

$$\mathcal{I}_{\varphi_i}(0) := \begin{pmatrix} 0 & \cos \varphi_i & \sin \varphi_i \\ 0 & \sin \varphi_i & -\cos \varphi_i \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.17)$$

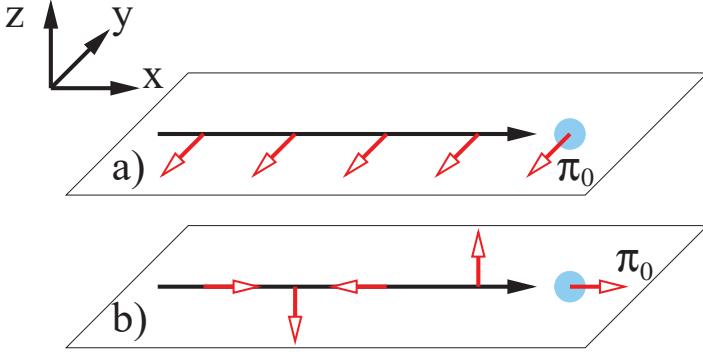
$$\mathcal{K}(x) := \begin{pmatrix} \cos 2k_{\text{so}}x & \sin 2k_{\text{so}}x & 0 \\ -\sin 2k_{\text{so}}x & \cos 2k_{\text{so}}x & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.18)$$

A (3.16) eredmény részletes elemzése helyett a beeső nyaláb polarizációjának helyfüggését két konkrét példán mutatjuk be a 3.2. ábrán. Az egyszerűség kedvéért és az általánosság megszorítása nélkül a $\varphi_i = 0$ esetet tekintjük, azaz amikor a $\mathcal{R}_{\varphi_i=0, \mathbf{H}_0}$ beeső nyaláb az x tengely mentén halad. Ilyenkor az impulzusfüggő effektív mágneses tér az y tengely irányába mutat. Az (a) ábrán a $\mathbf{H}_0 = (0, 0, 1)$ helicitásvektorral jellemzett állapot spin-dinamikáját látjuk. Mivel ez az állapot helicitás-sajátállapot, ezért ebben az esetben a polarizáció párhuzamos az effektív mágneses térrel, így a spin nem forog. A (b) ábrán viszont, ahol $\mathbf{H}_0 = (0, 1, 0)$, azaz a vizsgált állapot nem rendelkezik jól definiált helicitással, a spin forog az effektív mágneses tér körül. Megjegyezzük, hogy a $\boldsymbol{\pi}_0$ origóbeli polarizációvektor (3.16) alapján

$$\boldsymbol{\pi}_0 := \mathbf{P}^{(\text{in})}(\mathbf{r} = 0) = \mathcal{I}_{\varphi_i}(0) \mathbf{H}_0, \quad (3.19)$$

kapcsolatban áll a \mathbf{H}_0 helicitásvektorral, ami a 3.2. ábrán bemutatott (a) és (b) beeső nyalábok esetén könnyen ellenőrizhető.

Térjünk most vissza eredeti problémánkhoz, a szórási folyamat leírásához. Értelmes de-



3.2. ábra. (a) Helicitás-sajátállapot síkhullám spin-dinamikája; $\mathbf{H}_0 = (0, 0, 1)$. (b) Helicitás-sajátállapotok szuperpozíciójaként kapott síkhullám spin-dinamikája; $\mathbf{H}_0 = (0, 1, 0)$. Mindkét ábrán a nagyobb nyíl jelzi a síkhullám haladási irányát ($\varphi_i = 0$), a kisebb nyílak pedig a lokális polarizációvektort. A kör alakú tartomány a koordinátarendszer origóját jelöli, π_0 pedig az origóbeli polarizációvektor.

finiálni egy adott (3.14) beeső nyalábhoz tartozó *szórt nyalábot* a következőképpen:

$$\mathcal{R}^{(\text{sc})}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') := \sum_{m=1}^n w_m \psi_{\varphi_i \gamma(m)}^{(\text{sc})}(\mathbf{r}) \left[\psi_{\varphi_i \gamma(m)}^{(\text{sc})}(\mathbf{r}') \right]^\dagger. \quad (3.20)$$

Bevezetve az $I_{\varphi_i}^{(\text{sc})}(\mathbf{r}) := \left(\psi_{\varphi_i,+}^{(\text{sc})}(\mathbf{r}), \psi_{\varphi_i,-}^{(\text{sc})}(\mathbf{r}) \right)$ mennyiséget, amely egy 2×2 komplex mátrix, (3.20) átalakítható:

$$\mathcal{R}^{(\text{sc})}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = I_{\varphi_i}^{(\text{sc})}(\mathbf{r}) \rho_0 \left[I_{\varphi_i}^{(\text{sc})}(\mathbf{r}') \right]^\dagger. \quad (3.21)$$

Kifejeztük tehát a szórt nyalábot a beeső nyaláb ρ_0 helicitás-sűrűségmátrixával, vagy ami ezzel egyenértékű, a $\mathbf{H}_0 = \mathbf{q}(\rho_0) = \text{Tr}(\rho_0 \boldsymbol{\sigma})$ helicitás-vektorával. A továbbiakban a fenti szórt nyalábot $\mathcal{R}_{\varphi_i \rho_0}^{(\text{sc})}$ -al vagy $\mathcal{R}_{\varphi_i \mathbf{H}_0}^{(\text{sc})}$ -al jelöljük.

3.2.4. Hatáskeresztmetszet

Az alábbiakban újra használni fogjuk a 2.2.4. szakaszban bevezetett, a $H_\nu^{(+)}$ Hankel-függvényeket egyre nagyobb argumentumok esetén egyre jobban közelítő $\tilde{H}_\nu^{(+)}$ függvényeket.

Bevezetjük továbbá a $\tilde{\psi}_{\varphi_i\gamma}^{(\text{sc})}$ függvényeket: definíció szerint ezeket úgy képezzük, hogy a $\psi_{\varphi_i\gamma}^{(\text{sc})}$ hullámfüggvényt megadó képletben ((3.11) és (3.13)) minden $H^{(+)}$ függvényt $\tilde{H}^{(+)}$ -ra cserélünk. A $\tilde{\psi}_{\varphi_i\gamma}^{(\text{sc})}$ függvényt a *szórt hullám aszimptotikus alakjának* nevezzük, és világos, hogy ez $O(r^{-3/2})$ rendű közelítését adja $\psi_{\varphi_i\gamma}^{(\text{sc})}$ -nak.

Definiáljuk a *szórási amplitúdó mátrixot* az S -mátrix segítségével az alábbi módon:

$$f_{\tau'\tau}(\varphi, \varphi_i) := \frac{1}{\sqrt{2\pi i k_\tau}} \sum_{j', j \in \mathbb{J}} e^{ij'(\varphi - \pi/2)} F_{j'j}^{(\tau'\tau)} e^{-ij(\varphi_i - \pi/2)}. \quad (3.22)$$

Nem jelöltük ugyan, de természetesen az f szórási amplitúdó mátrix az S -mátrixon keresztül függ az energiától is. Belátható, hogy a szórt hullám aszimptotikus alakja az alábbi módon fejezhető ki az f szórási amplitúdóval:

$$\tilde{\psi}_{\varphi_i\gamma}^{(\text{sc})}(\mathbf{r}) = \frac{e^{ikr}}{\sqrt{r}} D(r, \varphi) f(\varphi, \varphi_i) \gamma, \quad (3.23)$$

ahol $D(r, \varphi) := (e^{-ik_{\text{so}}r} \eta_+(\varphi), e^{ik_{\text{so}}r} \eta_-(\varphi))$ egy 2×2 -es komplex unitér mátrix.

Mivel nagy r -ekre $\tilde{\psi}_{\varphi_i\gamma}^{(\text{sc})}$ jól közelíti $\psi_{\varphi_i\gamma}^{(\text{sc})}$ -t, ezért nyilván az

$$\tilde{\mathcal{R}}_{\varphi_i, \rho_0}^{(\text{sc})}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') := \frac{1}{\sqrt{rr'}} e^{ik(r-r')} D(r, \varphi) f(\varphi, \varphi_i) \rho_0 [f(\varphi', \varphi_i)]^\dagger [D(r', \varphi')]^\dagger \quad (3.24)$$

állapot nagy r és r' esetén jól közelíti az $\mathcal{R}_{\varphi_i, \rho_0}^{(\text{sc})}$ szórt nyalábot. Az $\tilde{\mathcal{R}}_{\varphi_i, \rho_0}^{(\text{sc})}$ állapotot hívjuk a továbbiakban a *szórt nyaláb aszimptotikus alakjának*.

Elemi számolás bizonyítja, hogy az $\mathcal{R}_{\varphi_i, \rho_0}$ beeső nyalábbbán a (2.11) definícióval értelmezett áramsűrűség nagysága, ahol most a \mathbf{v} sebességoperátort (3.8) adja meg, bármely \mathbf{r} pontban $\hbar k/m^* =: j_0$. Jelölje továbbá az $\mathcal{R}_{\varphi_i, \rho_0}^{(\text{sc})}$ szórt nyaláb áramsűrűségének radiális komponensét valamely \mathbf{r} pontban $j_r(\mathbf{r}; \varphi_i, \rho_0)$. A differenciális szórási hatáskeresztmetszet definíciója

$$\sigma_{\text{diff}}(\varphi, \varphi_i, \rho_0) := \frac{\lim_{r \rightarrow \infty} r j_r(r, \varphi; \varphi_i, \rho_0)}{j_0}. \quad (3.25)$$

A differenciális szórási hatáskeresztmetszet kiszámolásakor a szórt nyaláb helyettesíthető annak aszimptotikus alakjával, hiszen mindenképpen az $r \rightarrow \infty$ limeszt kell vennünk a számolás végén. A (2.11), (3.8), (3.24) és (3.25) képletek alapján

$$\sigma_{\text{diff}}(\varphi, \varphi_i, \rho_0) = \text{Tr} \left\{ f(\varphi, \varphi_i) \rho_0 [f(\varphi, \varphi_i)]^\dagger \right\}. \quad (3.26)$$

A (2.21) és a (2.22) definíciókhoz teljesen hasonlóan vezetjük be a *teljes hatáskeresztmetszet* és a *transport-hatáskeresztmetszet* fogalmát. A szórási amplitúdó mátrix $f = \sum_{l=0}^3 u_l \sigma_l$ Pauli-felbontását használva a differenciális hatáskeresztmetszet kifejezhető a beeső nyaláb \mathbf{H}_0 helicitás-vektorával:

$$\sigma_{\text{diff}}(\varphi, \varphi_i, \mathbf{H}_0) = c(\varphi, \varphi_i) + \mathbf{v}(\varphi, \varphi_i) \cdot \mathbf{H}_0, \quad (3.27)$$

ahol c -t és \mathbf{v} -t (2.25) és (2.26) definiálja. A fenti képletben a beeső nyaláb \mathbf{H}_0 helicitás-vektorát kifejezhetjük (3.19) alapján a beeső nyaláb origóbeli polarizációvektorával. Ekkor tehát

$$\sigma_{\text{diff}}(\varphi, \varphi_i, \boldsymbol{\pi}_0) = c(\varphi, \varphi_i) + [\mathcal{I}_{\varphi_i}(0) \mathbf{v}(\varphi, \varphi_i)] \cdot \boldsymbol{\pi}_0. \quad (3.28)$$

A (3.28) eredményünk rávilágít a Rasba-modell szórási folyamatainak egy lényeges tulajdonságára: a differenciális hatáskeresztmetszet attól függ, hogy mi a beeső nyaláb polarizációja az origóban, azaz a szórócentrum „közepén”. Ez ugyanis azt jelenti, hogy ha tekintünk egy adott beeső nyalábot, és vizsgáljuk annak szóródását egy $V(\mathbf{r})$ szórópotenciálon, akkor a vonatkozó differenciális hatáskeresztmetszet nem feltétlenül egyezik meg azzal, amikor a szórás a V eltojtjaként adódó $V'(\mathbf{r}) := V(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ ($\mathbf{r}_0 \neq 0$) potenciálon történik, hiszen a két esetben a spin forgása miatt a szórócentrum „közepén” eltérhet a beeső nyaláb polarizációvektora. A Rasba-modell ebben a tulajdonságában lényegesen eltér azoktól a modellektől, amelyekben a spin-pálya kölcsönhatás csak a szennyezők közelében van jelen.

3.2.5. Polarizáció

Belátható, hogy a szórt nyaláb $\tilde{\mathcal{R}}_{\varphi_i \rho_0}^{(\text{sc})}$ aszimptotikus alakjának $\tilde{\mathbf{P}}^{(\text{sc})}$ polarizációvektora az \mathbf{r} pontban

$$\tilde{\mathbf{P}}^{(\text{sc})}(\mathbf{r}, \varphi_i, \rho_0) = \mathcal{I}_{\varphi}(0) \mathcal{K}(r) \tilde{\mathbf{H}}^{(\text{sc})}(\varphi, \varphi_i, \rho_0), \quad (3.29)$$

ahol bevezettük a *szórt nyaláb aszimptotikus helicitás-vektorát*:

$$\tilde{\mathbf{H}}^{(\text{sc})}(\varphi, \varphi_i, \rho_0) := \frac{\text{Tr} \left\{ f(\varphi, \varphi_i) \rho_0 [f(\varphi, \varphi_i)]^\dagger \boldsymbol{\sigma} \right\}}{\sigma_{\text{diff}}(\varphi, \varphi_i, \rho_0)}. \quad (3.30)$$

A szórt nyaláb aszimptotikus polarizációjának a (3.29) képlet által leírt helyfüggése teljesen analóg a beeső nyalábok polarizációjának helyfüggésével (ld. 3.2.3. szakasz): a φ irányba szórt nyaláb polarizáció-vektora a haladási irányra (φ) és a z tengelyre egyaránt merőleges

tengely, azaz az effektív mágneses tér „indukcióvektora” körül forog, ha az r koordinátát változtatjuk.

A szórt nyaláb aszimptotikus helicitás-vektora a (2.28) eredményhez teljesen hasonlóan kifejezhető a beeső nyaláb helicitás-vektorával és az f szórási amplitúdó mátrix Pauli-feltöltésében szereplő együtthatókkal:

$$\tilde{\mathbf{H}}^{(\text{sc})}(\varphi, \varphi_i, \mathbf{H}_0) = \frac{\mathbf{w}(\varphi, \varphi_i) + \mathcal{M}(\varphi, \varphi_i) \mathbf{H}_0}{\sigma_{\text{diff}}(\varphi, \varphi_i, \mathbf{H}_0)}, \quad (3.31)$$

ahol a háromdimenziós valós \mathbf{w} vektort (2.29), a 3×3 -as valós \mathcal{M} mátrixot pedig (2.30) definiálja.

3.3. Szimmetriák analízise

Miután az előző szakaszokban teljesen tetszőleges V szórópotenciál esetén kifejeztük a differenciális szórási hatáskeresztmetszetet és a szórt nyaláb aszimptotikus polarizációját az S -mátrix segítségével, most megvizsgáljuk, hogy ezek az általános eredmények hogyan egyszerűsödnek le, ha a rendszer bizonyos szimmetriákkal rendelkezik. Az előző fejezethez hasonlóan azt az esetet tekintjük, amikor a V szórópotenciált egy, a 2DEG közelében elhelyezkedő töltött szennyező kelti. Láttuk, hogy egy ilyen szennyező V tere invariáns az időtükrözésre, a 2DEG-re merőleges tengely körüli forgatásokra és egy speciálisan választott kombinált tértükrözési-spinforgatási műveletre, azaz $[i\sigma_y C, V] = [J_z, V] = [\sigma_y P_x, V] = 0$, tehát V az előző fejezetben bevezetett elnevezést használva egyszerű. Tény továbbá, hogy maga a homogén Rasba-kölcsönhatás is invariáns erre a három transzformációra.

A 2.4. szakaszban ismertetett bizonyításhoz teljesen hasonlóan belátható, hogy ha a vizsgált V szórópotenciál kommutál a $i\sigma_y C$ vagy J_z vagy $\sigma_y P_x$ operátorokkal, akkor az S -mátrix elemeire vonatkozó következmények rendre

$$S_{j'j}^{(\tau'\tau)} = \tau' \tau e^{i(j-j')\pi} S_{-j, -j'}^{(\tau\tau')}, \quad (3.32)$$

$$S_{j'j}^{(\tau'\tau)} = \delta_{j'j} S_{j'j}^{(\tau\tau)}, \quad (3.33)$$

$$S_{j'j}^{(\tau'\tau)} = \tau' \tau e^{i(j-j')\pi} S_{-j', -j}^{(\tau\tau')}. \quad (3.34)$$

3.3.1. Spinbillentő visszaszórás

A fenti szimmetrianalízis következményeként az alábbi szakaszban belátjuk, hogy ha a V szórópotenciál invariáns az időtükrözésre, azaz $[V, i\sigma_y C] = 0$, akkor bármely φ_i és $\tau \in \{\pm\}$ esetén

$$f_{\tau\tau}(\varphi_i + \pi, \varphi_i) = 0. \quad (3.35)$$

Tudjuk, hogy a φ_i irányba haladó τ helicitású síkhullám polarizációvektora a síkbeli $\varphi_i - \tau\pi/2$ irányba mutat, míg a $\varphi_i + \pi$ irányba szórt, azaz „visszaszórt” τ helicitású hullám polarizációvektora ezzel éppen ellentétes: a síkbeli $\varphi_i + \tau\pi/2$ irányba mutat. Tehát (3.35) ugyanazt fejezi ki, mint a 2.4.1. szakaszban bemutatott tétel: időtükrözésre invariáns szórópotenciál esetén a spinbillentő visszaszórás valószínűsége zérus. Mivel a 2. fejezetben vizsgált (2.1) Hamilton-operátor felfogható a Rasba-féle Hamilton-operátor egy speciális esetének, amikor is $k_{so} = 0$, ezért a (3.35) eredmény valójában a 2.4.1. szakasz tételének egy általánosítása.

Lássuk most a (3.35) bizonyítását. Bármely $\tau \in \{\pm\}$ esetén vezessük be a következő függvényt:

$$g_{\tau\tau}(\varphi, \varphi_i) := \frac{1}{\sqrt{2\pi i k_\tau}} \sum_{j'j \in \mathbb{Z}} e^{-ij(\varphi - \pi/2)} (-1)^{j-j'} F_{j'j}^{(\tau\tau)} e^{ij'(\varphi_i - \pi/2)}. \quad (3.36)$$

A (3.22) és a (3.32) következménye, hogy $g_{\tau\tau} = f_{\tau\tau}$. Márpedig ekkor

$$f_{\tau\tau}(\varphi_i + \pi, \varphi_i) = \frac{1}{2} [f_{\tau\tau}(\varphi_i + \pi, \varphi_i) + g_{\tau\tau}(\varphi_i + \pi, \varphi_i)], \quad (3.37)$$

amiből közvetlen számolással adódik az állítás, azaz (3.35). A bizonyítás a T -mátrix formalizmus keretei között is elvégezhető, ehhez az 5.1. függelékben bemutatott gondolatmenet általánosítására van szükség.

3.3.2. Ferde szórás

Lássuk, hogy a szórópotenciál szimmetriáinak milyen következményei vannak a differenciális szórási hatáskeresztmetszetre nézve. A továbbiakban csak egyszerű potenciálokkal foglalkozunk, azaz olyanokkal, melyek mindhárom említett szimmetriával rendelkeznek. A következő kérdésre keressük a választ: következik-e az egyszerű szórópotenciálok három szimmetriájából, hogy a rajtuk való szóródás soha nem ferde, azaz igaz-e, hogy egyszerű szórópotenciál esetén $\sigma_{\text{diff}}(\varphi_i + \alpha, \varphi_i, \mathbf{H}_0) = \sigma_{\text{diff}}(\varphi_i - \alpha, \varphi_i, \mathbf{H}_0)$ bármely \mathbf{H}_0 , φ_i és α esetén?

Első lépésként az f szórási amplitúdó mátrix alakját írjuk fel: a (3.22) definíció és a (3.32),

(3.33) és (3.34) eredmények következménye, hogy egyszerű szórópotenciálok esetén

$$f_{\tau,\tau}(\theta) = \sqrt{\frac{2}{\pi i k_\tau}} \sum_{j \in \mathbb{J}^+} \cos(j\theta) F_{jj}^{(\tau,\tau)}, \quad (3.38)$$

$$f_{-\tau,\tau}(\theta) = \sqrt{\frac{2i}{\pi k_\tau}} \sum_{j \in \mathbb{J}^+} \sin(j\theta) F_{jj}^{(-\tau,\tau)}, \quad (3.39)$$

ahol $\theta := \varphi - \varphi_i$ és $\mathbb{J}^+ := \{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots\}$. Látható, hogy az f szórási amplitúdó mátrix elemei nem függenek expliciten a φ és φ_i szögektől, csak azok különbségétől, a θ szórási szögtől.

Látható, hogy f_{++} és f_{--} páros, míg f_{-+} és f_{+-} páratlan függvényei a θ szórási szögnek. Emiatt a szórási amplitúdó mátrix $f = \sum_{l=0}^3 u_l \sigma_l$ Pauli-felbontásában szereplő $u_l(\theta)$ függvények közül u_0 és u_3 páros, míg u_1 és u_2 páratlan függvénye θ -nak. Ennek és a (2.25), (2.26) definícióknak a következménye, hogy a differenciális hatáskeresztmetszet (3.27) kifejezésében szereplő c és v_3 páros, míg v_1 és v_2 páratlan függvénye θ -nak. Ebből viszont két további tény következik. Először is az, hogy a fenti, egyszerű szórópotenciálokra vonatkozó szimmetriamegfontolások alapján a $\sigma_{\text{diff}}(\theta, \mathbf{H}_0)$ differenciális hatáskeresztmetszet biztosan páros függvénye θ -nak, ha a beeső nyaláb \mathbf{H}_0 helicitásvektora párhuzamos $(0, 0, 1)$ -gyel, azaz ha a beeső nyaláb helicitás-sajátállapot, vagy a két helicitás-sajátállapot inkoherens keveréke. Másodszor pedig, a szimmetriamegfontolások nem zárják a differenciális hatáskeresztmetszet aszimmetrikus voltát, azaz a ferde szórást abban az esetben, ha \mathbf{H}_0 nem párhuzamos a $(0, 0, 1)$ vektorral.

Ez utóbbi tény jelentőségét megpróbáljuk a következő gondolatmenettel megvilágítani. Tekintsünk most egy olyan V szórópotenciált, amely centrális és spinfüggetlen. Világos, hogy V egyszerű potenciál, tehát igaz rá az előző bekezdés két eredménye. Továbbá V nem csak egyszerű, de további szimmetriákkal is rendelkezik, kommutál például az elektronspin bármely komponensével. Jogos a kérdés: a V potenciál ezen további szimmetriái kizárják-e a ferde szórás lehetőségét? A válasz: nem. Hiszen a szimmetriamegfontolások gondolatmenetében nem a V szimmetriatulajdonságai játszanak szerepet, hanem a teljes $H = H_0 + V$ Hamilton-operátor szimmetriatulajdonságai. Márpedig ha H_0 a Rasba-féle Hamilton-operátor (és persze $k_{\text{so}} \neq 0$), akkor hiába rendelkezik V a szokásos három szimmetrián kívül például spinforgatási szimmetriával, hiszen H_0 , és ennél fogva H nem rendelkezik azzal. Eredményeink tehát azt mutatják, hogy a Rasba-modellben centrális és spinfüggetlen szórópotenciálon is létrejöhet ferde szórás.

c	v_1	v_2	v_3	w_1	w_2	w_3	\mathcal{M}_{11}	\mathcal{M}_{12}	\mathcal{M}_{13}	\mathcal{M}_{22}	\mathcal{M}_{23}	\mathcal{M}_{33}
S	A	A	S	A	A	S	S	S	A	S	A	S

3.1. táblázat. Szórás a Rasba-modellben egyszerű potenciálon. A hatáskeresztmetszetet (3.27) és a szórt nyaláb aszimptotikus polarizációját (3.29) meghatározó mennyiségek egzakt szimmetriarelációi. S (A) jelöli azokat a mennyiségeket, amelyek a szórási szögnek páros (páratlan) függvényei. \mathcal{M}_{ij} és \mathcal{M}_{ji} ugyanazt a szimmetriatulajdonságot mutatja minden $i, j \in \{1, 2, 3\}$ esetén.

3.3.3. Polarizáció

Az a tény, hogy az egyszerű szórópotenciálokhoz tartozó szórási amplitúdó mátrix diagonális (offdiagonális) elemei páros (páratlan) függvényei a θ szórási szögnek, bizonyos konzekvenciákat jelent a szórt nyaláb $\tilde{\mathbf{P}}^{(\text{sc})}$ aszimptotikus polarizációját megadó a (3.29) és (3.31) képletekben megjelenő \mathbf{w} és \mathcal{M} mennyiségekre nézve. A szimmetriatulajdonságokat a 3.1. táblázatban foglaltuk össze.

Minket elsősorban az érdekel, hogy teljesen polarizálatlan beeső nyaláb esetén, azaz ha $\mathbf{H}_0 = 0$, a szórt nyaláb polarizációja lehet-e véges. Másképpen fogalmazva, egy egyszerű szórópotenciál működhet-e polarizátorként? A válasz kiolvasható a (3.29) és (3.31) képletekből és a 3.1. táblázatból. Egy általános szórócentrum nem működhet polarizátorként, ha a hozzá tartozó \mathbf{w} vektor azonosan eltűnik, $\mathbf{w} = 0$. Az egyszerű szórópotenciálok szimmetriái azonban csak azt garantálják, hogy w_1 és w_2 páratlan, w_3 pedig páros függvénye a θ szórási szögnek, azt nem, hogy \mathbf{w} azonosan eltűnne. Az előző szakasz gondolatmenetét megismételve állíthatjuk, hogy a Rasba-modellre vonatkozó szimmetriamegfontolások centrális és spinfüggetlen szórópotenciálok esetén sem zárják ki a polarizáló tulajdonság megjelenését.

3.4. Born-közelítés

Ebben a szakaszban az S -mátrix közelítő alakját határozzuk meg az első Born-közelítésben. Az egyszerűség kedvéért csak a spinfüggetlen centrális szórópotenciál esetét vizsgáljuk. Követjük a 2.5. szakaszban ismertetett sémát: tekintjük a $\mathfrak{J}_{j\sigma}$ perturbálatlan állapotot, és a Lippmann-Schwinger-egyenlet perturbációban elsőrendű (2.53) közelítéséből határozzuk meg a perturbáció miatt létrejövő teljes szórási hullámfüggvényt. Ehhez

v_1	v_2	v_3	w_1	w_2	w_3
0	A	S	0	A	S

3.2. táblázat. Szórás a Rasba-modellben spinfüggetlen centrális potenciálon a Born-közelítésben. S (A) jelöli azokat a mennyiségeket, amelyek a szórási szögnek páros (páratlan) függvényei. 0 jelöli azokat a mennyiségeket, amelyek a szimmetriák következtében azonosan nullák.

szükségünk van a homogén rendszer retardált Green-függvényére, ami [65] alapján

$$G_0^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{im^*}{2\hbar^2} \sum_{j \in \mathbb{J}} \sum_{\tau \in \{\pm\}} \mathfrak{H}_{j\tau}^{(+)}(\mathbf{r}) [\mathfrak{J}_{j\tau}(\mathbf{r}')]^\dagger. \quad (3.40)$$

Spinfüggetlen centrális potenciál esetében a „perturbáció” $H_1 = V(r)\sigma_0$, ahol $V(r)$ valós értékű. A teljes szórási hullámfüggvény meghatározása után az eredményből leolvashatjuk az S -mátrix elemeit:

$$S_{j,j}^{(\tau',\tau)} = -\frac{i2\pi m^*}{\hbar^2} B_{j,j}^{(\tau',\tau)} + \delta_{\tau',\tau}, \quad (3.41)$$

ahol

$$B_{j,j}^{(\tau',\tau)} = \frac{\sqrt{k_\tau k_{\tau'}}}{2k} \int_0^\infty dr r V(r) [\tau' \tau J_{j-1/2}(k_{\tau'} r) J_{j-1/2}(k_\tau r) + J_{j+1/2}(k_{\tau'} r) J_{j+1/2}(k_\tau r)]. \quad (3.42)$$

Az S -mátrix impulzumomentumban offdiagonális elemei a forgásszimmetria miatt eltűnnek. A Bessel-függvények tulajdonságait [56] használva belátható, hogy az S -mátrix elemeire a Born-közelítésben kapott eredmények kielégítik az egyszerű potenciálokra általánosan érvényes (3.32), (3.33) és (3.34) szimmetriarelációkat.

A (3.41) eredményből levezethetők a szórás jellemző mennyiségek Born-közelítésben érvényes szimmetriatulajdonságai. A \mathbf{v} és \mathbf{w} mennyiségekre vonatkozólag ezeket a 3.2. táblázatban foglaltuk össze. A 3.1. táblázattal való összevetésből kiderül, hogy a Rasba-modell esetén is igaz, hogy az első Born-közelítésben a szórás jellemző fizikai mennyiségek szimmetriarelációi szigorúbbak, mint az egzakt eredményekre vonatkozó relációk. Emellett az is látható, hogy spinfüggetlen centrális szórópotenciál esetén is már az első Born-közelítésben megjelenik a ferde szórás jelensége – hiszen \mathbf{v} -nek van olyan komponense, amely páratlan függvénye a szórási szögnek –, és a szórócentrum polarizátorként való működése – hiszen \mathbf{w} nem tűnik el.

3.5. Szennyezők „merev fal” modellje

Ebben a szakaszban egy konkrét példán keresztül szemléltetjük eddigi eredményeinket. Vizsgáljuk az alábbi spinfüggetlen centrális potenciált:

$$V(r) := \begin{cases} 0, & \text{ha } r < R \\ \infty, & \text{egyébként} \end{cases} \quad (3.43)$$

Világos, hogy ez a potenciál a hullámfüggvényekre vonatkozólag Dirichlet-határfeltételt jelent az R sugarú köríven, azaz bármely reguláris ψ hullámfüggvényre a $\psi(r = R, \varphi) = 0$ feltételnek teljesülnie kell tetszőleges φ esetén. A számolás során először az S -mátrix elemeit határozzuk meg, majd ezek segítségével az eddigi elméleti eredményeket felhasználva vizsgáljuk a szórási állapotokat.

Megjegyezzük, hogy ezen konkrét probléma megoldását egymástól függetlenül, és körülbelül egyidőben Yeh és munkatársai [72], valamint Eric Heller csoportja [73] publikálták először. Előbbiek elsősorban az egzakt hullámfüggvények szórócentrumhoz közeli spin-mintázataát vizsgálták, míg az utóbbi publikáció témája az volt, hogy milyen hatással van a Rasba-effektus bizonyos pásztázó szondás képalkotó módszerekre [74, 75].

Az S -mátrix származtatásához tekintsük a $\mathfrak{H}_{j\tau}^{(-)}$ befutó hengerhullám szóródását leíró hullámfüggvényt:

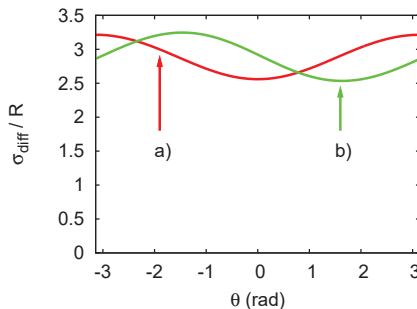
$$\psi_{j\tau} = \mathfrak{H}_{j\tau}^{(-)} + S_j^{(+,\tau)} \mathfrak{H}_{j,+}^{(+)} + S_j^{(-,\tau)} \mathfrak{H}_{j,-}^{(+)}, \quad (3.44)$$

ahol $S_j^{(\tau'\tau)} := S_{jj}^{(\tau'\tau)}$, és felhasználtuk a (3.10) és a (3.33) összefüggéseket. Az együtthatók a Dirichlet-határfeltétel segítségével határozhatók meg, amely esetünkben automatikusan kielégül, ha a $\psi_{j\tau}(r = R, \varphi = 0) = 0$ egyenlőség teljesül. Ez az egyenlőség az ismeretlen $s_j^{(\tau)} := (S_j^{(+,\tau)}, S_j^{(-,\tau)})$ kételemű komplex vektorra nézve egy $M_j s_j^{(\tau)} = b_j^{(\tau)}$ alakú inhomogén lineáris egyenletrendszerre vezet, ahol

$$M_j := \begin{pmatrix} H_{j-1/2}^{(+)}(X_+) & -H_{j-1/2}^{(+)}(X_-) \\ H_{j+1/2}^{(+)}(X_+) & H_{j+1/2}^{(+)}(X_-) \end{pmatrix}, \quad (3.45)$$

$$b_j^{(\tau)} := \begin{pmatrix} -\tau H_{j-1/2}^{(-)}(X_\tau) \\ -H_{j+1/2}^{(-)}(X_\tau) \end{pmatrix}, \quad (3.46)$$

és $X_\tau := k_\tau R$. A lineáris egyenletrendszer elemi úton megoldható, és a megoldásként kapott S -mátrix elemei kielégítik az egyszerű potenciálokra vonatkozó a (3.32), (3.33) és (3.34) szimmetriarelációkat.



3.3. ábra. Differenciális szórási hatáskeresztmetszet Rasba-2DEG-ben. A beeső nyaláb helicitásvektora (a) $\mathbf{H}_0 = (0, 0, 1)$ (b) $\mathbf{H}_0 = (0, 1, 0)$. További paraméterek: $kR = 0.04$, $k_{\text{so}}/k = 0.1$.

Az S -mátrix elemeinek ismeretében a differenciális hatáskeresztmetszetet a (3.27), a polarizációvektort pedig a (3.29) képlet alapján számíthatjuk ki. Megemlítjük, hogy az eredményül kapott c , \mathbf{v} , \mathbf{w} és \mathcal{M} mennyiségek pontosan a 3.1. táblázatban összefoglalt szimmetriatulajdonságokat teljesítik. A ferde szórás jelenségét a 3.3. ábrán szemléltetjük, ahol adott paraméterek mellett a differenciális hatáskeresztmetszetet rajzoltuk fel a 3.2. ábrán bemutatott (a) és (b) beeső nyaláb esetére. A 3.3. ábrán látható, hogy a jól definiált helicitással rendelkező (a) beeső nyaláb esetén nem lép fel ferde szórás, míg a nem helicitás-sajátállapot (b) nyaláb esetében az effektus megjelenik. Megjegyezzük, hogy a konkrét példa esetén használt $k_{\text{so}}/k = 0.1$ paraméterérték a realisztikus paramétertartományban van, tehát nincs szükség extrém erősségű Rasba-csatolásra ahhoz, hogy a ferde szórás ilyen mértékű legyen.

3.6. Spin-dipólusok szennyezők körül

A fejezet eddigi szakaszaiban adott energiájú, adott irányba haladó síkhullámok szóródását vizsgáltuk a Rasba-modell keretein belül. Ebben a szakaszban azt vizsgáljuk, hogy a 2DEG-en átfolyó gyenge egyenáram milyen spin-eloszlást indukál izolált szennyezők környezetében. Látni fogjuk, hogy a jelenség leírható a szórásprobléma S -mátrix formalizmusát használva, hasonlóan a mintán átfolyó egyenáram által indukált Landauer-féle töltés-

dipólusok elméletéhez [76, 77]. A spin-dipólus problémáját Malshukov és Chu vizsgálták először [78] spinfüggetlen centrális potenciálok esetén, a Rasba-csatolás erősségében és a potenciálban vezető rendű eredményt közölve. Ebben a szakaszban az általunk levezetett szimmetriarelációkra alapozva az ő eredményüket általánosítjuk egyszerű szórópotenciálokra.

Az eddigiekben a síkhullámokat, a hozzájuk tartozó szórt hullámokat és a szórási folyamatokat leíró teljes hullámfüggvényeket energiájukkal, a síkhullám haladási irányával és a helicitás-kvantumszámmal indexeltük: $\phi_{E\varphi_i\tau}$, $\psi_{E\varphi_i\tau}^{(\text{sc})}$, $\psi_{E\varphi_i\tau}$. Általában az energiára utaló E indexet elhagytuk. A továbbiakban viszont módosítunk eddigi jelölésünkön, és a hullámfüggvények E és φ_i indexe helyett a \mathbf{q} hullámszámvektort használjuk majd: $\phi_{\mathbf{q},\tau}$, $\psi_{\mathbf{q},\tau}^{(\text{sc})}$, $\psi_{\mathbf{q},\tau}$. Bevezetjük továbbá a \mathbf{q} irányszögének jelölésére a $\varphi_{\mathbf{q}}$ jelet. Tehát a továbbiakban

$$\phi_{\mathbf{q},\tau}(\mathbf{r}) := \eta_{\tau}(\varphi_{\mathbf{q}})e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}, \quad (3.47)$$

és egyszerűen belátható, hogy

$$H_0\phi_{\mathbf{q},\tau} = \frac{\hbar^2}{2m^*} (q^2 + \tau 2qk_{\text{so}}) \phi_{\mathbf{q},\tau} =: \varepsilon_{\mathbf{q},\tau} \phi_{\mathbf{q},\tau}, \quad (3.48)$$

ahol $q := |\mathbf{q}|$. Az új jelölések bevezetésére azért van szükség, mert a továbbiakban a Fermi-tenger állapotaira való felösszegzéseket fogunk végezni, amit a hullámszám-térben a legkényelmesebb végrehajtani.

Mielőtt a 2DEG-en átfolyó gyenge egyenáram esetét vizsgálnánk, tekintsünk egy általánosabb problémát: tegyük fel, hogy adott az elektronok f eloszlásfüggvénye, azaz a \mathbf{q} és τ kvantumszámokkal jellemzett síkhullám szóródását leíró $\psi_{\mathbf{q},\tau}$ kvantumállapot betöltöttsége $f(\mathbf{q}, \tau)$. Adjuk meg a spinsűrűségnek a 2DEG síkjára merőleges $\sigma^{(z)}(\mathbf{r})$ komponensét! A $\psi_{\mathbf{q},\tau}$ állapotban a spin z -komponensének sűrűsége (a továbbiakban csak spinsűrűség)

$$\sigma_{\mathbf{q},\tau}^{(z)}(\mathbf{r}) = [\psi_{\mathbf{q},\tau}(\mathbf{r})]^\dagger \sigma_z \psi_{\mathbf{q},\tau}(\mathbf{r}). \quad (3.49)$$

Adott $f(\mathbf{q}, \tau)$ eloszlásfüggvény esetén az elektronállapotok eredő spinsűrűsége

$$\sigma^{(z)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \sum_{\tau \in \{\pm\}} \int d^2\mathbf{q} f(\mathbf{q}, \tau) \sigma_{\mathbf{q},\tau}^{(z)}(\mathbf{r}). \quad (3.50)$$

A (3.50) képletet akár végeredménynek is tekinthetnénk: bármely \mathbf{q} és τ kvantumszám esetén $\psi_{\mathbf{q},\tau}$ az S -mátrix elemeiből kiszámolható, tehát az eredő spinsűrűség származtatható

az integrál elvégzésével, ha ismerjük a szennyezőt jellemző S -mátrixot és az elektronokat jellemző eloszlásfüggvényt. Látni fogjuk azonban, hogy az integrál elvégzése nélkül is tehetünk megállapításokat az eredő sűrűségek szimmetriatulajdonságaira, ha az $f(\mathbf{q}, \tau)$ eloszlásfüggvény rendelkezik bizonyos szimmetriákkal. Később pedig megmutatjuk, hogy az integrál elvégzése jelentősen leegyszerűsödik, ha az eredő sűrűségeknek csak a szórócentrumtól távoli viselkedését vizsgáljuk.

3.6.1. Az eredő spinsűrűség szimmetriatulajdonságai

Ebben a szakaszban bemutatjuk, hogy az $f(\mathbf{q}, \tau)$ eloszlásfüggvény és a szórópotenciál bizonyos szimmetriatulajdonságai milyen következményt vonnak maguk után az eredő spinsűrűsége vonatkozáslag. A továbbiakban mindvégig egyszerű szórópotenciálokról lesz szó.

Először azt az esetet vizsgáljuk, amikor az $f(\mathbf{q}, \tau)$ eloszlásfüggvény forgásinvariáns, azaz $f(\mathbf{q}, \tau) \equiv f(q, \varphi\mathbf{q}, \tau) = f(q, \tau)$. Azt állítjuk, hogy ebben az esetben a spinsűrűség az egész síkon zérus, azaz $\sigma^{(z)}(\mathbf{r}) = 0$. A egyszerű szórópotenciál forgásszimmetrikus is, amiből következik, hogy $\sigma_{\mathbf{q}, \tau}^{(z)}(r, \varphi)$ a φ és a $\varphi\mathbf{q}$ szögektől csak a $\varphi - \varphi\mathbf{q}$ szórási szögön keresztül függ, így alkalmazhatjuk a $\sigma_{\mathbf{q}, \tau}^{(z)}(r, \varphi - \varphi\mathbf{q}) := \sigma_{\mathbf{q}, \tau}^{(z)}(r, \varphi)$ jelölést. A szórópotenciál egyszerű voltának következménye, hogy az egyes kvantumállapotok spinsűrűsége antiszimmetrikus függvénye a szórási szögnek, azaz

$$\sigma_{\mathbf{q}, \tau}^{(z)}(r, \varphi - \varphi\mathbf{q}) = -\sigma_{\mathbf{q}, \tau}^{(z)}(r, \varphi\mathbf{q} - \varphi) \quad (3.51)$$

tetszőleges r esetén, azaz nem csak a szórópotenciál R hatósugarán kívül. Márpedig az antiszimmetria következményeként adódik, hogy a (3.50) alapján kapott

$$\sigma^{(z)}(r, \varphi) = \frac{1}{(2\pi)^2} \sum_{\tau \in \{\pm\}} \int_0^\infty dq q f(q, \tau) \int_0^{2\pi} d\varphi \mathbf{q} \sigma_{\mathbf{q}, \tau}^{(z)}(r, \varphi - \varphi\mathbf{q}) \quad (3.52)$$

eredményben a $\varphi\mathbf{q}$ szerinti integrál nullát ad. Így az állítást beláttuk.

Feltehető, hogy ha a 2DEG-ben x irányú egyenáram folyik, akkor a nemegyensúlyi eloszlásfüggvény nem forgásszimmetrikus, viszont szimmetrikus a \mathbf{q} -tér x tengelyére való tükrözésre. Most ezt az esetet vizsgáljuk, legyen tehát az f eloszlásfüggvény olyan, hogy $f(q, \varphi\mathbf{q}, \tau) = f(q, -\varphi\mathbf{q}, \tau)$. Erre az esetre vonatkozó állításunk: az eredő spinsűrűség antiszimmetrikus a szórócentrum közepén áthaladó, az áramiránnyal párhuzamos tengelyre, azaz

$\sigma^{(z)}(r, \varphi) = -\sigma^{(z)}(r, -\varphi)$. A bizonyításhoz a (3.50) képletből indulunk ki:

$$\begin{aligned}
 \sigma^{(z)}(r, \varphi) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \sum_{\tau \in \{\pm\}} \int d^2\mathbf{q} f(\mathbf{q}, \tau) \sigma_{q\tau}^{(z)}(r, \varphi - \varphi\mathbf{q}) = \\
 &= -\frac{1}{(2\pi)^2} \sum_{\tau \in \{\pm\}} \int d^2\mathbf{q} f(\mathbf{q}, \tau) \sigma_{q\tau}^{(z)}(r, \varphi\mathbf{q} - \varphi) = \\
 &= -\frac{1}{(2\pi)^2} \sum_{\tau \in \{\pm\}} \int d^2\mathbf{q} f(\mathbf{q}, \tau) \sigma_{q\tau}^{(z)}(r, -\varphi - \varphi\mathbf{q}) = -\sigma^{(z)}(r, -\varphi). \quad (3.53)
 \end{aligned}$$

A levezetésben először a (3.51) eredményt, majd pedig az eloszlásfüggvény tükrözési szimmetriáját használtuk fel. A két eredményt összefoglalva: egyszerű szórópotenciál esetén egyensúlyban, azaz a Fermi-Dirac statisztikával megegyező eloszlásfüggvény esetén a Fermi-tenger elektronjainak eredő spinsűrűsége nulla; ha pedig a 2DEG-en az x irányban egyenáram folyik át, akkor akkor a spinsűrűség antiszimmetrikus az áram irányával párhuzamos, a szórópotenciál középpontján áthaladó egyenesre.

3.6.2. Aszimptotikus viselkedés

A szórt hullám aszimptotikus alakját tetszőleges véges hatótávolságú szórópotenciál esetén megadja a (3.23) összefüggés. Ezen eredmény helicitás-sajátállapot síkhullámok esetére való megszorítását fogalmazzuk újra az imént bevezett új indexelési szisztéma figyelembevételével:

$$\tilde{\psi}_{\mathbf{q}\tau}^{(\text{sc})}(\mathbf{r}) = \frac{e^{ik(\mathbf{q}, \tau)r}}{\sqrt{r}} D(r, \varphi) f(\varphi, \varphi\mathbf{q}) \gamma^{(\tau)}, \quad (3.54)$$

ahol $k(\mathbf{q}, \tau) := q + \tau k_{\text{so}}$, $\gamma^{(+)} := (1, 0)^T$ és $\gamma^{(-)} := (0, 1)^T$. Újra megjegyezzük, hogy bár explicit módon nem jelöljük, de az f szórási amplitúdó mátrix függ a \mathbf{q} és τ kvantumszámoktól az energián keresztül.

A (3.54) eredmény következménye, hogy a \mathbf{q} és τ kvantumszámokkal jellemzett állapot spinsűrűségét a szórócentrumtól távol a $\tilde{\psi}_{\mathbf{q}, \tau} := \phi_{\mathbf{q}, \tau} + \tilde{\psi}_{\mathbf{q}, \tau}^{(\text{sc})}$ jelölést bevezetve a következő

alakban írhatjuk fel:

$$\begin{aligned}
 \tilde{\sigma}_{\mathbf{q},\tau}^{(z)}(\mathbf{r}) &= \left[\tilde{\psi}_{\mathbf{q},\tau}(\mathbf{r}) \right]^\dagger \sigma_z \tilde{\psi}_{\mathbf{q},\tau}(\mathbf{r}) = \left[\mathcal{I}_{\varphi\mathbf{q}}(0) \mathbf{H}_0^{(\tau)} \right]_z + \frac{1}{r} \sigma_{\text{diff}}^{(\tau)}(\varphi, \varphi\mathbf{q}) \left[\tilde{\mathbf{P}}^{(\text{sc})}(\mathbf{r}, \varphi\mathbf{q}, \mathbf{H}_0) \right]_z - \\
 &- \frac{1}{r} \sqrt{\frac{8\pi}{q}} \text{Re} \left\{ e^{i\pi/4} e^{i2k_{\text{so}}r} f_{-\tau,\tau}(\varphi\mathbf{q}, \varphi\mathbf{q}) \right\} \delta(\varphi - \varphi\mathbf{q}) - \\
 &- \frac{1}{r} \sqrt{\frac{8\pi}{q}} \text{Re} \left\{ e^{i\pi/4} e^{2iqr} f_{\tau,\tau}^{(\pi)}(\varphi\mathbf{q}) \right\} \delta(\varphi - (\varphi\mathbf{q} + \pi)). \tag{3.55}
 \end{aligned}$$

Itt $\mathbf{H}_0^{(\tau)} := (0, 0, \tau)^T$, $f^{(\pi)}(\varphi\mathbf{q}) := f(\varphi\mathbf{q} + \pi)$ és δ a Dirac-deltát jelöli. A (3.55) összefüggés csak disztribúció-értelemben, azaz „integráljel után” használandó. Levezetéséhez felhasználtuk a szintén disztribúció-értelemben használatos

$$e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \approx \sqrt{\frac{2\pi}{qr}} \left[e^{i(qr-\pi/4)} \delta(\varphi - \varphi\mathbf{q}) + e^{-i(qr-\pi/4)} \delta(\varphi - (\varphi\mathbf{q} + \pi)) \right] \tag{3.56}$$

közelítést [77], amely egyre nagyobb $\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}$ értékek esetén egyre pontosabb. A (3.55) eredményünk tetszőleges szórópotenciál esetén érvényes.

Az $\mathcal{I}_{\varphi\mathbf{q}}(0)$ mátrix (3.17) definíciójának egyenes következménye, hogy (3.55) első tagja zérus. A továbbiakban megmutatjuk, hogy ha a vizsgált szórópotenciál egyszerű, akkor (3.55) drasztikusan leegyszerűsödik. Először is, a spinbillentő visszaszórás teljes hiányára vonatkozó (3.35) eredményünk alapján ha a szórópotenciál invariáns az időtükrözésre, akkor $f_{\tau,\tau}^{(\pi)}(\varphi\mathbf{q}) = f_{\tau,\tau}(\varphi\mathbf{q} + \pi, \varphi\mathbf{q}) = 0$, tehát ilyenkor (3.55) negyedik tagja nulla. Másrészt viszont a (3.35) tételhez teljesen hasonlóan belátható, hogy ha a szórópotenciál egyszerre kommutál a J_z és a $\sigma_y P_x$ operátorokkal, akkor bármely \mathbf{q} és τ esetén $f_{-\tau,\tau}(\varphi\mathbf{q}, \varphi\mathbf{q}) = 0$, azaz (3.55) harmadik tagja is zérus, hiszen egyszerű szórópotenciálokat vizsgálunk. Világos tehát, hogy egyszerű szórópotenciál esetén a szimmetriák következményeképpen (3.55) lényegesen leegyszerűsödik: a jobb oldalnak csak a második tagja különbözik nullától, így a teljes szórási állapothoz tartozó spinsűrűséget a szórt hullám spinsűrűsége határozza meg. A (3.29) és (3.31) alapján:

$$\tilde{\sigma}_{\mathbf{q},\tau}^{(z)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \left\{ \mathcal{I}_{\varphi}(0) \mathcal{K}(r) \left[\mathbf{w}(\varphi, \varphi\mathbf{q}) + \mathcal{M}(\varphi, \varphi\mathbf{q}) \mathbf{H}_0^{(\tau)} \right] \right\}_z. \tag{3.57}$$

A továbbiakban mindvégig feltesszük, hogy a vizsgált szórópotenciál egyszerű, ezért a szórócentrum környezetében kialakuló spinsűrűség aszimptotikus alakjának számításakor a (3.57) alakot fogjuk használni.

3.6.3. A spin-dipólus aszimptotikus alakja

A (3.50) képlet megadja a szennyező körül kialakuló eredő spinsűrűséget az $f(\mathbf{q}, \tau)$ eloszlásfüggvény ismeretében. Ebből következik, hogy a szórócentrumtól nagy távolságra a spinsűrűség:

$$\tilde{\sigma}^{(z)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \sum_{\tau \in \{\pm\}} \int d^2\mathbf{q} f(\mathbf{q}, \tau) \tilde{\sigma}_{\mathbf{q}, \tau}^{(z)}(\mathbf{r}). \quad (3.58)$$

Az alábbiakban kiszámoljuk a szennyező körül kialakuló nemegyensúlyi spinsűrűség aszimptotikus alakját arra az esetre, amikor a mintán x irányú gyenge egyenáram folyik át. A továbbiakban a zérushőmérsékleti viselkedést vizsgáljuk, és feltesszük, hogy az egyensúlyi rendszert jellemző Fermi-energia E_F . Defináljuk továbbá a $k_F := \sqrt{2m^*E_F/\hbar^2 + k_{so}^2}$ hullámszám dimenziójú mennyiséget, továbbá a két különböző helicitás-quantumszámhoz tartozó Fermi-hullámszámot: $q_F^{(\tau)} := k_F - \tau k_{so}$.

Feltesszük továbbá, hogy gyenge átfolyó áram esetén, azaz az egyensúlyi állapothoz közel a rendszert jellemző eloszlásfüggvény $f(\mathbf{q}, \tau) = f_0(\varepsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{q}_0}, \tau)$, ahol $\mathbf{q}_0 = (q_0, 0, 0)$ és $q_0 \ll k_F$ [2, 77]. Itt f_0 az egyensúlyi Fermi-Dirac statisztikát jelöli, feltevésünk szerint tehát a nemegyensúlyi eloszlásfüggvényt az egyensúlyi eloszlásfüggvény reciproktérbeli kis eltolásával kapjuk meg. A nemegyensúlyi eloszlásfüggvényt a számolás során a

$$f(\mathbf{q}, \tau) \approx f_0(\varepsilon_{\mathbf{q}, \tau}) - \frac{\hbar^2}{m^*} f'_0(\varepsilon_{\mathbf{q}, \tau}) \mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{q} \quad (3.59)$$

alakkal helyettesítjük majd, ami a q_0/k_F és k_{so}/k_F kis paraméterekben lineáris rendig pontos.

A nemegyensúlyi eloszlásfüggvény ezen közelítő alakjának ismeretében nincs más hátra, mint elvégezni a (3.58) integrált. Az integrált két részre bontjuk: a (3.59) eloszlásfüggvény első tagja az egyensúlyi Fermi-Dirac statisztika, aminek járuléka a spinsűrűségben zérus, ahogy azt a 3.6.1. szakaszban beláttuk. Emiatt a spinsűrűséget az eloszlásfüggvény második tagja határozza meg. Mivel zérus hőmérsékleten $f'_0(\varepsilon) = -\delta(\varepsilon - E_F)$, ezért az integrálási változóknak a $(q, \varphi_{\mathbf{q}})$ polárkoordinátákra térve át és alkalmazva a Dirac-delta megfelelő tulajdonságát, a következő eredményre jutunk:

$$\tilde{\sigma}^{(z)}(r, \varphi) = \frac{1}{4\pi^2} \frac{q_0}{k_F} \sum_{\tau \in \{\pm\}} \left[q_F^{(\tau)} \right]^2 \int_0^{2\pi} d\varphi_{\mathbf{q}} \cos \varphi_{\mathbf{q}} \tilde{\sigma}_{\mathbf{q}, \tau}^{(z)}(r, \varphi - \varphi_{\mathbf{q}}), \quad (3.60)$$

ahol az aszimptotikus spinsűrűsége vonatkozólag is bevezettük a $\tilde{\sigma}_{\mathbf{q}, \tau}^{(z)}(\varphi - \varphi_{\mathbf{q}}) := \tilde{\sigma}_{\mathbf{q}, \tau}^{(z)}(r, \varphi)$ jelölést. Ebből az alakból kiindulva hosszadalmas, de nehézségektől mentes számolás végén

adódik, hogy

$$\tilde{\sigma}^{(z)}(r, \varphi) = -\frac{1}{r} \sin \varphi [\sin(2k_{\text{so}}r)c_2 + \cos(2k_{\text{so}}r)c_1], \quad (3.61)$$

ahol

$$c_i := \frac{1}{4\pi^2} \frac{q_0}{k_{\text{F}}} \sum_{\tau \in \{\pm\}} \left[q_{\text{F}}^{(\tau)} \right]^2 (\bar{w}_i + \tau \bar{\mathcal{M}}_{i,3}), \quad (3.62)$$

ahol $i \in \{1, 2\}$ és bármely $f \in \{w_1, w_2, \mathcal{M}_{13}, \mathcal{M}_{23}\}$ esetén $\bar{f} := \int_0^{2\pi} d\theta \sin \theta f(\theta)$. A levezetésnél felhasználtuk \mathbf{w} és \mathcal{M} elemeinek egyszerű szórópotenciálok esetétén érvényes szimmetriatulajdságait, melyeket a 3.1. táblázatban foglaltunk össze.

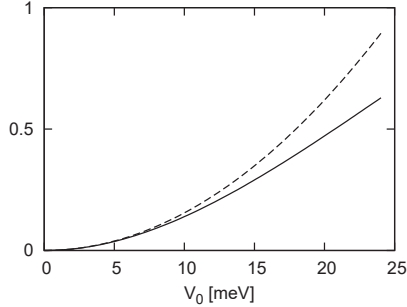
3.6.4. Diszkuszió

A (3.61) eredmény szerint tehát a 2DEG-en átfolyó x irányú gyenge egyenáram által indukált spin-eloszlás antiszimmetrikus az x tengelyre, ahogy azt a 3.6.1. szakasz szimmetriamegfontolásai alapján vártuk is. Az eloszlás a k_{so} hullámszámnak megfelelő hullámhosszal oszcillálva cseng le. Az eredmény bármilyen egyszerű szórópotenciál esetén érvényes, és a szórópotenciál konkrét alakjától csak a $c_{1,2}$ konstansokon keresztül függ. Ezek a konstansok arányosak q_0 -lal, azaz a Fermi-Dirac-eloszlás reciproktérbeli eltolását jellemző hullámszámvektorral. A rendszeren átfolyó gyenge áram is arányos q_0 -lal [2], ezért a spin-dipólus erőssége lineárisan függ az átfolyó áram erősségétől.

A spin-dipólus problémáját Malshukov és Chu vizsgálta először [78]. A számítást spinfüggetlen centrális szórópotenciálok esetére végezték el, szintén zérus hőmérsékleten, és vezető rendben a potenciál és a Rasba-féle spin-pálya-kölcsönhatás erősségében. Eredményül kapták, hogy a spin-eloszlásnak a távolsággal lassan lecsengő komponense (3.61) alakú, ahol $c_1 = 0$ és

$$c_2 = \frac{q_0 k_{\text{so}} \sigma_{\text{tr}}}{2\pi^2}. \quad (3.63)$$

Itt σ_{tr} a szórópotenciált jellemző transzport-hatáskeresztmetszet a Rasba-effektus nélküli rendszerben ($k_{\text{so}} = 0$) az első Born-közelítésben. A (3.63) eredmény módot ad arra, hogy nagyságrendi becslést adjunk a spin-dipólus helyén a spinsűrűség és az elektronsűrűség viszonyára. Ismert, hogy homogén 2DEG-ben a Fermi-hullámszám és a felületi elektronsűrűség közti kapcsolat $n_s = k_{\text{F}}^2/(2\pi)$. Tegyük fel továbbá, hogy a szórópotenciál hatótávolsága R , és hogy a spin-dipólus aszimptotikus alakjára vonatkozó (3.61) összefüggés a centrumtól néhányszor R távolságban már jól közelíti a tényleges spinsűrűséget. Ha feltesszük, hogy a σ_{tr} transzport-hatáskeresztmetszet az R hatótávolsággal nagyságrendileg megegyezik, akkor



3.4. ábra. A spin-dipólus amplitúdója a szórópotenciál erősségének függvényében. Az y tengelyen a spin-dipólus erősségét jellemző dimenziótlanított $2\pi^2 c_2 / (q_0 k_{so} R)$ mennyiséget mérjük. A folytonos vonal jelzi a szórópotenciálban egzakt eredményt, a szaggatott vonal pedig a vezetőrendű eredményt. Paraméterek: $E_F = 27$ meV, $R = 10$ nm, $k_{so} = 0.01$ nm $^{-1}$, $m^* = 0.014 m_0$.

mindebből az következik, hogy a polarizáció nagyságrendje maximum

$$\frac{\sigma^{(z)}}{n_s} \sim \frac{q_0 k_{so}}{k_F^2}. \quad (3.64)$$

Mivel a spin-dipólus alakjának levezetésében szerepet játszik az a feltevés, hogy mind q_0 , mind pedig k_{so} legalább egy nagyságrenddel kisebb, mint k_F , ezért a vizsgált modell maximum százalékos nagyságrendű polarizációt jósol.

Az általunk levezetett (3.61) képlet Malshukov és Chu eredményének általánosítása. A (3.61) eredmény egyrészt tetszőleges egyszerű szórópotenciál esetén érvényes, másrészt pedig a potenciál erősségében nem csak a vezetőrendű járulékot tartalmazza, hanem tetszőleges rendig pontos, hiszen a levezetésben csak az egzakt szórási állapotokra vonatkozó szimmetriarelációkat használtuk fel. A két eredmény közötti különbséget demonstráljuk a 3.4. ábrán. A vizsgált szórópotenciál $V(r) = V_0 \Theta(r - R)$ alakú, a rendszert jellemző további paraméterek pedig a k_{so} Rasba-csatolás, a E_F Fermi-energia és az m^* effektív tömeg. Az S -mátrix kiszámolása hasonló módon történik, mint a 2.6. és a 3.5. szakaszokban, ezért a részleteket itt nem közöljük. Az S -mátrix ismeretében \mathbf{w} és \mathcal{M} szükséges komponensei megkaphatók, ezek segítségével pedig $c_{1,2}$ felírható (3.61) alapján. A 3.4. ábrán egy konkrét, InSb

kvantumgödör esetére vonatkozó paraméterhalmaz esetén jól látható, hogy a c_2 mennyiségre Malshukov és Chu által kapott eredmény (szaggatott vonal) – ami a V_0/E_F paraméterben másodrendű, hiszen az első Born-közelítésben kiszámolt transzport-hatáskeresztmetszetet tartalmazza –, kis V_0/E_F értékekre jól követi az általunk származtatott, a potenciálban egzakt eredményt (folytonos vonal). Amikor viszont V_0 és E_F azonos nagyságrendbe esik, az egzakt eredményben a magasabbrendű korrekciók is megjelennek, itt tehát már nem érvényes a (3.63) képlet. Az ábrán nem ábrázoltuk a c_1 mennyiséget, de megjegyezzük, hogy az egzakt eredmények szerint a V_0/E_F paraméter függvényében c_1 harmadrendű görbeként indul, ami megerősíti Malshukov és Chu azon eredményét, hogy a potenciálban másodrendig számolva $c_1 = 0$.

Félvezető 2DEG-ekben a spinpolarizáció síkra merőleges komponense a Kerr-rotáció jelenségét kihasználva mérhető [19]. A kísérletben lineárisan polarizált fénynyalábot bocsátanak a minta egy bizonyos pontjára, és mérik a visszavert nyaláb polarizációját. A polarizáció síkjának elfordulásából következtetni lehet az elektronrendszer lokális polarizációjának a 2DEG síkjára merőleges komponensére. Elvileg az ebben a fejezetben vizsgált nemegyensúlyi spin-dipólus nem csak félvezető heteroszerkezetekben jöhet létre. Bizonyos fémek (pl. Au) esetén ugyanis a minta felületén kialakuló 2DEG-ben is észlelhető a Rasba-effektussal analóg spin-pálya-felhasadás [79–81]. Az ilyen mintákban a Rasba-effektus és következményei közvetlenül vizsgálhatók pásztázó szondás módszerekkel [82], ami a feltételezések szerint lehetővé teszi, hogy a spin-dipólust mágneses tűszonda segítségével észleljék [78].

3.7. Összefoglalás

Ebben a fejezetben a Rasba-féle spin-pálya-csatolás hatása alatt levő 2DEG-ben lezajló rugalmas szórási folyamatok tulajdonságait vizsgáltuk. Első lépésként általánosítottuk az S -mátrix formalizmust a Rasba-féle Hamilton-operátor esetére, majd kifejeztük a szórási folyamatot jellemző két mennyiséget, a differenciális szórási hatáskeresztmetszetet és a szórt nyaláb aszimptotikus polarizációját az S -mátrix elemeivel. Egyszerű, azaz az időtükrözésre, forgatásra és a kombinált tértükrözés-spinforgatás műveletére invariáns szórópotenciál esetén levezettük a hatáskeresztmetszetre és a polarizációra vonatkozó szimmetriarelációkat. Beláttuk, hogy a Rasba-féle spin-pálya kölcsönhatás jelenlétében mind a ferde szórás jellege, mind pedig a szórócentrum polarizátorként való működése megvalósulhat akkor is, ha a szórópotenciál centrális és spinfüggetlen. A ferde szórás jelenségét a szennyezők „merev fal” modelljén egzakt eredményekkel demonstráltuk.

Meghatároztuk az S -mátrix elemeit az első Born-közelítésben spinfüggetlen centrális szórópotenciálok esetére. Levezettük a szórást leíró mennyiségek Born-közelítésbeli alakjára vonatkozó szimmetriarelációkat. A két- és háromdimenziós Mott-szórás problémájához hasonlóan itt is azt találtuk, hogy a Born-közelítésben kiszámolt szimmetriarelációk szigorúbbak az egzakt eredményre vonatkozó relációknál. Emellett megmutattuk, hogy a ferde szórás jelensége és a szórócentrum polarizátorként való működése már az első Born-közelítésben megjelenik.

Az egzakt szimmetriarelációk alkalmazásaképpen megvizsgáltuk, hogy a 2DEG-en átfolyó gyenge egyenáram milyen spin-eloszlást indukál izolált szennyezők környezetében. Kizárólag szimmetriamegfontolásokat használva levezettük Malshukov és Chu [78] eredményének egy általánosítását. Egy konkrét szórópotenciál esetén meghatároztuk az átfolyó áram hatására kialakuló spin-dipólus erősségét.

4. fejezet

Kausztikák grafén n - p átmenetben

4.1. Bevezetés

Az egyetlen grafitrétegből álló grafén elektronjainak energiaspektrumában a spinnek minimális szerepe van. Mégis, ahogy azt a dolgozat bevezetőjében már említettük, a grafén elektronrendszerének kvázirészecskéi rendelkeznek egy spinhez hasonló belső szabadsági fokkal, hiszen az őket leíró effektív Schrödinger-egyenletben szereplő hullámfüggvény kétkomponensű. A hullámfüggvény két komponense a grafitréteget alkotó hatszögrács elemi cellájának két szénatomjára vonatkozó amplitúdókat tartalmazza. Az elektronrendszer a megfelelő feltételek esetén jól modellezhető az alábbi effektív Hamilton-operátorral [43]:

$$H_0 = c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}, \quad (4.1)$$

ahol c egy sebesség dimenziójú paraméter, közelítőleg a fénysebesség három ezreléke, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ a Pauli-mátrixokból alkotott vektor, amit a grafén esetében az irodalomban általában a „pszeudospin operátorának” neveznek, valamint $\mathbf{p} = -i\hbar(\partial_x, \partial_y)$ az impulzus operátora. (A (4.1) modell érvényességi körét a 4.5. szakaszban tárgyaljuk.) Lényeges hasonlóság H_0 és a Rasba-modell (3.1) Hamilton-operátora között, hogy mindkét operátorban szerepel egy olyan tag, amelyik lineáris és izotrop módon összecsatolja az impulzust és a belső szabadsági fokot. Ennek a hasonlóságnak az a következménye, hogy a grafénbeli szórásproblémák az S -mátrix formalizmusban a Rasba-modellbeli szórásproblémákkal teljesen analóg módon kezelhetők. Mivel az előző szakaszban ez utóbbi problémakört már tárgyaltuk, ezért rendelkezésünkre áll minden eszköz a módszernek a grafénre való általánosításához. A szoros analógia miatt ebben a fejezetben eltekintünk a teljes formalizmus ismételt leírásától, helyett csupán a konkrét alkalmazáshoz szükséges részleteket tisztázzuk majd.

A grafén olyan félvezető, melynek vezetési- és valenciasávja összeér, ezért egy grafénbeli, megfelelően keskeny n - p átmenetben az egyik oldalról érkező elektronok nagy valószínűséggel át tudnak alagutazni a másik oldalra. Ez a jelenség az ún. Klein-alagutazás [53, 54, 83]. Ebben a szakaszban belátjuk majd, hogy ilyenkor a kvázirészecskék haladási iránya az átmenet két oldalán egy olyan Snellius-Descartes-törvénynek tesz eleget, amelyben a törésmutató negatív mennyiség. Ennek következménye, hogy a törésmutató $n = -1$ értékre történő hangolása esetén egy ilyen n - p átmenet egy *pontforrásból* érkező elektronnyalábot képes tökéletesen fókuszálni [53]. A szórásprobléma S -mátrix formalizmusa módot ad arra, hogy a lehető legegyszerűbb olyan geometriát vizsgáljuk, amely alkalmas *párhuzamos* elektronnyaláb fókuszálására. Ez pedig a hengerszimmetrikus n - p átmenet [84], ahol a p tartomány egy adott

sugarú körön belül, az n tartomány pedig azon kívül helyezkedik el. Ebben a fejezetben az S -mátrix formalizmust használva az elektronok kvantummechanikai viselkedését vizsgáljuk a fenti rendszerben. Megmutatjuk, hogy ha a kör alakú tartomány belsejében az elektronok de Broglie hullámhossza jóval kisebb a kör sugaránál („kváziklasszikus limesz”), akkor a hullámfüggvények fő jellemzője az átmenet belsejében kialakuló, jól elkülönülő, magas részecskesűrűségű sávok kialakulása. Belátjuk, hogy a sávok kialakulása a részecskék klasszikus dinamikájának következménye, és a jelenség interpretálható a fent említett geometriai optikai képpel. Kiszámoljuk a klasszikus pályák burkolójaként előálló kausztika egyenletét, és megmutatjuk, hogy a kváziklasszikus limeszben a hullámfüggvény magas részecskesűrűségű sávjai és a kiszámolt görbe illeszkedik egymásra. Megvizsgáljuk azt a kérdést, hogy a fenti, egyelőre csak elméletben létező elektron-optikai rendszer működőképes lehet-e a realiztikus paramétertartományban.

A fejezetben bemutatott eredményeket a [84] publikációban közzétettük.

4.2. Kvantummechanikai tárgyalás

Az általunk vizsgált rendszer tehát egy hengerszimmetrikus n - p átmenet, amelyet az alábbi Hamilton-operátorral modellezünk:

$$H = H_0 + V(r), \quad (4.2)$$

ahol $V(r) = V_0\Theta(R - r)$ egy pseudospinben diagonális potenciál, $V_0 > 0$, Θ a Heaviside-függvény és R a kör alakú p tartomány sugara. Világos, hogy a (4.2) rendszert azok az elektronok érzik n - p átmenetnek, melyek E energiájára fennáll a $0 < E < V_0$ reláció, hiszen ekkor az R sugarú körön kívül az elektron a vezetési, míg azon belül a valenciasávban található. A továbbiakban csak ezt a paramétertartományt fogjuk vizsgálni.

Célunk annak vizsgálata, hogy a V szórócentrumra síkhullámként érkező párhuzamos elektronnyaláb hatására milyen teljes szórási hullámfüggvény alakul ki az átmenet belsejében. Első lépésként vizsgáljuk meg a parciális hengerhullámok szóródását! Mivel H kommutál a $J_z := -i\hbar\partial_\varphi + \hbar\sigma_z/2$ „pseudo-impulzusmomentum” operátorral, ezért a parciális hullámok J_z sajátállapotai lesznek. Egyszerű számolás bizonyítja, hogy az E energiához és a J_z operátor

$j \in \mathbb{J}$ (j félegész) sajátértékéhez tartozó parciális hullámok az n tartományban

$$\mathcal{H}_j^{(d)}(r, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} H_{j-\frac{1}{2}}^{(d)}(k_n r) e^{-i\varphi/2} \\ i H_{j+\frac{1}{2}}^{(d)}(k_n r) e^{i\varphi/2} \end{pmatrix} e^{ij\varphi} \quad (4.3)$$

alakúak [47, 84, 85], ahol $d = +$ ($d = -$) kifutó (befutó) hengerhullámokat jelöl, $k_n = E/(\hbar c)$ a részecske hullámszáma az n tartományban és $H^{(\pm)}$ az első- és másodfajú Hankel-függvényeket jelöli [56]. A p tartományban a Schrödinger-egyenletnek olyan megoldását kell megtalálnunk, amely reguláris az origóban. Belátható, hogy az E energiához és $j \in \mathbb{J}$ pseudo-impulzusmomentumhoz tartozó egyetlen megoldás

$$\mathfrak{J}_j(r, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} J_{j-\frac{1}{2}}(k_p r) e^{-i\varphi/2} \\ -i J_{j+\frac{1}{2}}(k_p r) e^{i\varphi/2} \end{pmatrix} e^{ij\varphi} \quad (4.4)$$

alakú, ahol $k_p = (V_0 - E)/(\hbar c)$ a részecske hullámszáma a p tartományban, és J a Bessel-függvényt jelöli [56].

Mivel $[H, J_z] = 0$, ezért egy adott pseudo-impulzusmomentummal rendelkező befutó hengerhullám szóródása során a pseudo-impulzusmomentum nem változhat meg. Emiatt feltételezzük, hogy egy kiszemelt $\mathcal{H}_j^{(-)}$ befutó hengerhullám szóródását leíró hullámfüggvény az n tartományban

$$\psi_j^{(n)} = \mathcal{H}_j^{(-)} + S_j \mathcal{H}_j^{(+)}, \quad (4.5)$$

a p tartományban pedig

$$\psi_j^{(p)} = A_j \mathfrak{J}_j \quad (4.6)$$

alakú, ahol S_j és A_j egyelőre ismeretlen paraméterek. Ezeket a paramétereket az R sugarú körívén érvényes határfeltételből lehet meghatározni. Mivel a Hamilton-operátor az impulzus lineáris függvénye, ezért a határon csupán a hullámfüggvény folytonosságának kell teljesülnie, tehát a határfeltétel $\psi_j^{(n)}(R, \varphi) = \psi_j^{(p)}(R, \varphi)$. A (4.5) és (4.6) egyenletek és a határfeltétel

segítségével S_j és A_j egyszerűen megkapható:

$$S_j = \frac{-H_{j-\frac{1}{2}}^{(-)}(X_n)J_{j+\frac{1}{2}}(X_p) - H_{j+\frac{1}{2}}^{(-)}(X_n)J_{j-\frac{1}{2}}(X_p)}{D_j}, \quad (4.7)$$

$$A_j = \frac{H_{j-\frac{1}{2}}^{(-)}(X_n)H_{j+\frac{1}{2}}^{(+)}(X_n) - H_{j+\frac{1}{2}}^{(-)}(X_n)H_{j-\frac{1}{2}}^{(+)}(X_n)}{D_j}, \quad (4.8)$$

$$D_j = H_{j-\frac{1}{2}}^{(+)}(X_n)J_{j+\frac{1}{2}}(X_p) + H_{j+\frac{1}{2}}^{(+)}(X_n)J_{j-\frac{1}{2}}(X_p), \quad (4.9)$$

ahol $X_{n,p} = k_{n,p}R$. Megjegyezzük, hogy az eredmény a modell paramétereitől (E, V_0, R) csak az X_n és X_p dimenziótlan mennyiségeken keresztül függ.

Az egyes hengerhullámok szóródását leíró hullámfüggvények ismeretében a szokásos módon megkonstruálhatjuk a síkhullám szóródását leíró hullámfüggvényt. A H_0 Hamilton-operátor φ_i irányba haladó síkhullám-sajátállapotai $E > 0$ esetén

$$\phi_{\varphi_i}(r, \varphi) = \eta(\varphi_i) e^{ik_n r \cos(\varphi - \varphi_i)}, \quad (4.10)$$

ahol

$$\eta(\varphi_i) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi_i/2} \\ e^{i\varphi_i/2} \end{pmatrix}. \quad (4.11)$$

A Hankel-függvények tulajdonságainak [56] felhasználásával megmutatható, hogy a ϕ_{φ_i} síkhullám az alábbi módon fejthető ki a $\mathcal{H}_j^{(\pm)}$ hengerhullámok soraként:

$$\phi_{\varphi_i} = \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathbb{J}} i^{j-\frac{1}{2}} \left(\mathcal{H}_j^{(-)} + \mathcal{H}_j^{(+)} \right) e^{-ij\varphi_i}. \quad (4.12)$$

Mivel a vizsgált rendszer forgásinvariáns, ezért a továbbiakban az általánosság megszorítása nélkül a $\varphi_i = 0$ esetet tekintjük, azaz feltesszük, hogy a beeső síkhullám haladási iránya egybeesik a koordináta-rendszer x tengelyével. A parciális hullámokra érvényes (4.5) és (4.6) képleteket felhasználva a szórási folyamatot leíró teljes hullámfüggvény az n tartományban az alábbi alakban írható fel:

$$\psi^{(n)} = \phi_{\varphi_i=0} + \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathbb{J}} i^{j-\frac{1}{2}} (S_j - 1) \mathcal{H}_j^{(+)}. \quad (4.13)$$

Ugyanezen összefüggések alapján a p tartományban a teljes hullámfüggvény:

$$\psi^{(p)} = \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathbb{J}} i^{j-\frac{1}{2}} A_j \mathfrak{J}_j. \quad (4.14)$$

A szórásprobléma megoldásának menete az előző fejezetekben ismertetett módszert követte. A $\psi^{(n)}$ hullámfüggvény szórócentrumtól távol érvényes aszimptotikus kifejtését véve itt is definiálhatnánk a szórási amplitúdót és a szórási hatáskeresztmetszetet. Jelen szakaszban azonban ehelyett a $\psi^{(n)}$ és $\psi^{(p)}$ összeillesztésével származtatható ψ teljes szórási hullámfüggvény p tartománybeli viselkedését elemezzük. A 4.3. és 4.4. ábrákon a rendszert jellemző X_n és X_p dimenziótlan paraméterek különböző értékei mellett ábrázoljuk a szórást leíró teljes hullámfüggvényből számolt részecskesűrűséget. Az ábrákon egyértelműen elkülönülő, magas részecskesűrűségű sávokat láthatunk. A következő szakaszokban a geometriai optika eszköztárát használva interpretáljuk a jelenséget.

4.3. Optikai analógia

Ahhoz, hogy a grafén elektronjainak fent tárgyalt viselkedését egy geometriai optikai képpel értelmezhesük, le kell vezetnünk egy egyenes mentén húzódó n - p átmenet „törési törvényét” [53, 54, 83]. A módszer teljesen analóg azzal, ahogy a klasszikus elektrodinamikában a Snellius-Descartes-törvény és a Fresnel-formulák levezethetők a Maxwell-egyenletekből [2]. A Maxwell-egyenletek szerepét itt a

$$[H_0 + V(x)]\psi(x, y) = E\psi(x, y) \quad (4.15)$$

Schrödinger-egyenlet játssza, ahol a H_0 homogén Hamilton-operátort (4.1) definiálja és $V(x) = V_0\Theta(x)$. A továbbiakban csak olyan állapotokat vizsgálunk, melyek energiája a $0 < E < V_0$ tartományba esik, hiszen ezek az elektronok érzik n - p átmenetnek a fenti rendszert.

Tekintsünk egy, az n tartományból érkező, E energiájú, síkhullám alakú energiasajátállapot,

$$\phi_i(x, y) = e^{ik_{nx}x} e^{ik_{ny}y} \eta(\alpha) \quad (4.16)$$

szóródását az n és p tartományok határán, ahol az egyszerűség kedvéért legyen $\alpha \in [0, \pi/2]$. Itt bevezettük a $k_{nx} = k_n \cos \alpha$, $k_{ny} = k_n \sin \alpha$ és $k_n = E/(\hbar c)$ jelöléseket, az η spinort pedig

(4.11) definiálja. Azt állítjuk, hogy ϕ_i olyan részecskét ír le, amely α beesési szöggel érkezik a határra. Ezt úgy lehet megmutatni, hogy vesszük a $\mathbf{v} = i[H_0, \mathbf{r}]/\hbar = c\boldsymbol{\sigma}$ sebesség-operátort, és kiszámítjuk, hogy a ϕ_i hullámfüggvény által definiált áramsűrűség

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \text{Re} [\phi_i(\mathbf{r})^\dagger \mathbf{v} \phi_i(\mathbf{r})] = c \begin{pmatrix} \cos \alpha \\ \sin \alpha \end{pmatrix}, \quad (4.17)$$

ami igazolja állításunkat. Mivel rendszerünk az y tengely irányában tetszőleges eltolással szemben invariáns, ezért a hullámszám y irányú komponense a szórás során megmarad. Megmarad továbbá az energia is, ezért a szórás eredményeképpen a beeső részecske vagy visszaverődik és a

$$\phi_r(x, y) = e^{-ik_{nx}x} e^{ik_{ny}y} \eta(\pi - \alpha) \quad (4.18)$$

állapotba szóródik, vagy áthalad a határon és a

$$\phi_t(x, y) = e^{ik_{px}x} e^{ik_{py}y} \chi(\pi + \beta) \quad (4.19)$$

állapotba szóródik. Itt

$$\chi(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i(\xi+\pi)/2} \\ e^{i(\xi+\pi)/2} \end{pmatrix}, \quad (4.20)$$

továbbá az impulzus y komponensének megmaradása miatt $k_{py} = k_{ny}$, valamint bevezettük a $k_{px} = -\sqrt{k_p^2 - k_{py}^2}$, $k_p = (V_0 - E)/(\hbar c)$ és $\beta = \arg(k_{px} + ik_{py}) - \pi$ jelöléseket. Az egyszerűség kedvéért csak azt a paramétertartományt vizsgáljuk, ahol teljes visszaverődés nem lép fel, azaz $k_p > k_{py}$. Egyszerű számolás bizonyítja, hogy mind ϕ_r , mind pedig ϕ_t valóban E energiájú sajátállapota H -nak. Szokatlannak tűnik, de ϕ_t olyan részecskét ír le, amely balról jobbra mozogva távolodik a tartományok határától, tehát megfelel a szórási állapotra vonatkozó fizikai elvárásnak. Ez a (4.17) számoláshoz teljesen hasonlóan látható be:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \text{Re} [\phi_t(\mathbf{r})^\dagger \mathbf{v} \phi_t(\mathbf{r})] = c \begin{pmatrix} \cos \beta \\ \sin \beta \end{pmatrix}. \quad (4.21)$$

Ebből az eredményből és β definíciójából látszik, hogy a ϕ_t állapotban a részecskeáram éppen a hullámszámvektorral ellentétes irányba folyik. A (4.17) és (4.21) eredményekből egyértelműen kitűnik, hogy esetünkben α a beesési szög, β pedig a törési szög szerepét játssza. A köztük fennálló, a Snellius-Descartes-törvénnyel analóg összefüggést [53] az impulzus y komponensének megmaradása alapján írhatjuk fel: $k_{ny} = k_{py}$, azaz $k_n \sin \alpha = k_p \sin(\pi + \beta)$,

amiből

$$\frac{\sin \alpha}{\sin \beta} = -\frac{k_p}{k_n} = \frac{E - V_0}{E} =: n, \quad (4.22)$$

ahol az n „törésmutató” negatív, hiszen az $0 < E < V_0$ energiatartományt vizsgáljuk.

A reflektált és transzmittált nyalábok intenzitását az elektrodinamikában a Fresnel-formulák adják meg. Ezekkel analóg összefüggéseket nyerhetünk, ha az n és p tartomány hullámfüggvényeit illesztjük a határon: $\phi_i(0, y) + r\phi_r(0, y) = t\phi_t(0, y)$, ahol r és t egyelőre ismeretlen paraméterek. A paraméterekre kapott inhomogén lineáris egyenletrendszer:

$$\begin{pmatrix} \eta(\pi - \alpha) & -\chi(\pi + \beta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r \\ t \end{pmatrix} = -\eta(\alpha). \quad (4.23)$$

Az egyenletrendszert megoldva a transzmisszió és a reflexió valószínűségére kapjuk [53]:

$$|t|^2 = \frac{\cos^2 \alpha}{\cos^2(\frac{\alpha+\beta}{2})}, \quad |r|^2 = 1 - |t|^2. \quad (4.24)$$

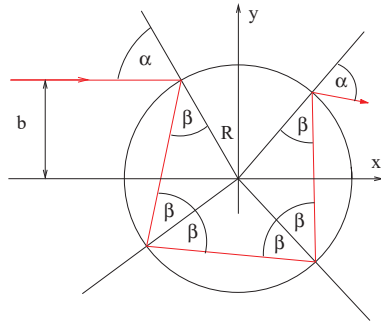
Megjegyezzük, hogy merőleges beesés, azaz $\alpha = 0$ esetén $|t|^2 = 1$, azaz a beeső részecske biztosan áthalad a potenciállépcsőn – ez az ún. Klein-alagutazás jelensége [53, 54, 83].

4.4. Kausztikák

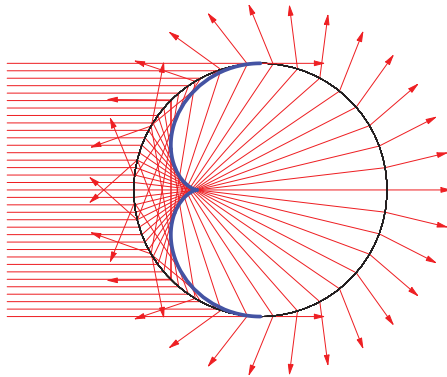
Ebben a szakaszban megmutatjuk, hogy a hullámfüggvény magas részecskesűrűségű sávjai és a geometriai optikai képből számolható, a klasszikus pályák burkolóiként előálló kausztikák illeszkednek egymásra, tehát a jelenség megérthető az n - p átmenet negatív törésmutatót tartalmazó Snellius-Descartes-törvényéből kiindulva.

A 4.1. ábra mutatja, hogy egy b impakt paraméterrel érkező elektronsugár megtörik az n - p átmenet határán, és $p - 1$ számú belső visszaverődést követően kilép a kör alakú tartományból. Az egyes pályákat a $b = R \sin \alpha$ impakt paraméter és körön belüli húrok p száma különbözteti meg. Adott p esetén a különböző impakt paraméterhez ($-R \leq b \leq R$) tartozó pályák egy görbesereget képeznek. A görbesereg burkolója kausztikát alkot, ahogy azt a 4.2. ábrán szemléltetjük. A kör különböző p értékekhez tartozó húrjai más-más kausztikát eredményeznek.

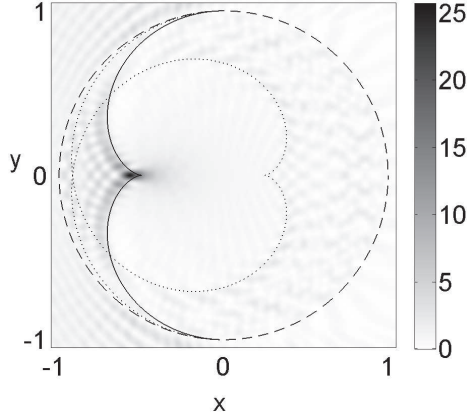
Differenciálgeometriai számolás eredményeként megkaphatjuk, hogy ha a törésmutató n ,



4.1. ábra. Klasszikus pályák a kör alakú n - p átmenetben. A b impakt paraméterrel és α beesési szöggel érkező elektronsugár β törési szöggel megtörik a két tartomány határán, és $p - 1$ belső visszaverődés után kilép a p tartományból. Paraméterek: $p = 3$, $n = -1.3$ és $\alpha = \pi/3$.



4.2. ábra. A megtört elektronsugarak burkolójaként adódó kausztika a p tartományban. A vastag vonallal jelölt kausztika egyenletét (4.25) adja meg. Paraméterek: $p = 1$ és $n = -1$.



4.3. ábra. $|\psi|^2$ a p tartomány közelében. A szaggatott vonal a p tartomány határát jelzi. A szórást jellemző dimenziótlan paraméterek $X_n = k_n R = 60$ és $X_p = k_p R = 60$, azaz a törésmutató $n = -1$. A koordinátatengelyek egysége R . A folytonos (pontozott) vonal a $p = 1$ ($p = 2$) húrhoz tartozó kausztikát jelzi.

akkor a p -edik húrokhoz tartozó kausztika paraméterezése

$$\frac{\mathbf{r}_c(\alpha; n, p)}{R} = (-1)^{p-1} \left[\begin{pmatrix} -\cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix} + \cos \beta \frac{1 + 2(p-1)\beta'}{1 + (2p-1)\beta'} \begin{pmatrix} \cos(\theta + \beta) \\ -\sin(\theta + \beta) \end{pmatrix} \right] \quad (4.25)$$

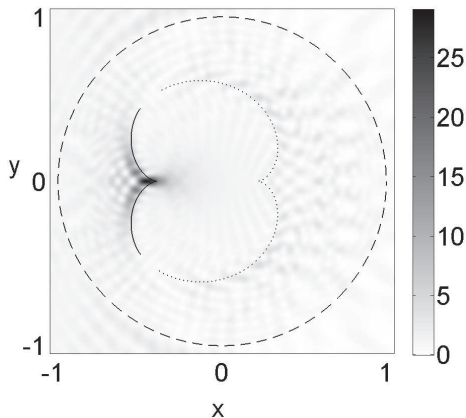
$$\theta(p, \alpha) = \alpha + 2(p-1)\beta, \quad (4.26)$$

$$\sin \beta = \frac{\sin \alpha}{|n|}, \quad (4.27)$$

$$\beta' = \frac{\cos \alpha}{\sqrt{n^2 - \sin^2 \alpha}}. \quad (4.28)$$

A 4.1. ábra alapján $\alpha \in [-\pi/2, \pi/2]$, és a vessző ($'$) az α szerinti deriválást jelöli. A 4.3 és 4.4. ábrák egyszerre mutatják az imént kiszámolt kausztikákat és a részecskesűrűség térbeli eloszlását két konkrét esetben. Az ábrákról egyértelműen látszik, hogy a kausztikák illeszkednek a magas részecskesűrűségű sávokra, tehát a Snellius-Descartes-törvényt használó geometriai optikai kép értelmezi a sávok kialakulását.

A p paraméter bármely értéke esetén a kausztikák jellegzetessége az x tengelyre eső csúcs.



4.4. ábra. A 4.3. ábrán szereplő mennyiségek az $X_n = k_n R = 40$ és $X_p = k_p R = 60$ paraméterértékek, azaz $n = -1.5$ esetén.

A kausztikák (4.25) egyenletéből a csúcs pozíciója egyszerűen kiszámolható, az eredmény a p és n paraméterek függvényében

$$(x_0, y_0) = \left(\frac{(-1)^p}{|n| - 1 + 2p} R, 0 \right). \quad (4.29)$$

A beeső paraxiális sugarak ($b \ll R$, $\alpha \ll \pi/2$) éppen a $p = 1$ paraméterértékhez tartozó csúcsban fókuszálódnak. Úgy is fogalmazhatunk, hogy a vizsgált elektron-optikai eszköz fókusz távolsága $f = R - |x_0(p = 1)|$. Mivel a fókuszpontban a legnagyobb a hullámfüggvény intenzitása, ezért egy kísérletben az f fókusz távolság a legkönnyebben mérhető mennyiség [86].

4.5. Diszkusszió

Az előző szakaszokban a hengerszimmetrikus n - p átmenet kvantumos és klasszikus modelljei alapján világos képet kaptunk a kvázirészecskék dinamikájól. Ebben a szakaszban azt a kérdést vizsgáljuk, hogy ez az egyelőre csak elméleti lehetőségként létező elektron-optikai

eszköz működőképes lenne-e a realiztikus paramétertartományban.

A konvencionális félvezetőkkel ellentétben grafénben az n - p átmenet létrehozásához nincs szükség kémiai adalékolásra. A kísérletekben a síkban modulált elektrosztatikus potenciál hozza létre az n és p tartományokat. Az elektrosztatikus potenciál profilja változtatható a grafénre illesztett kapuelektrodák töltésének vagy feszültségének változtatásával [48–51].

Mint azt a dolgozat bevezetőjében már említettük, a grafén elektronrendszerének egy teszőleges V elektrosztatikus potenciálban mozgó kvázirészecskéi akkor modellezhetők a $H_0 + V$ Hamilton-operátorral (ahol H_0 -t (4.1) definiálja), ha a V potenciál változásának d karakterisztikus hosszskáája jóval nagyobb, mint a szénatomok rácsának a rácsállandója [87]. Ennek megfelelően vizsgáljunk egy olyan, hengerszimmetrikus n - p átmenetet létrehozó $V_s(r)$ potenciált, ami nem lépcsőszerűen, hanem egy adott d távolságon csökken $V_s(R - d/2) = V_0$ értékről $V_s(R + d/2) = 0$ értékre. Ismert eredmény, hogy ekkor a $k_n d \sim k_p d \ll 1$ feltétel teljesülése esetén, azaz ha a kvázirészecskék de Broglie hullámhossza nagyobb a potenciál változására jellemző hossznál, akkor V_s jól közelíthető a $V_0 \Theta(R - r)$ lépcsőszerű potenciállal, hiszen ilyenkor a nagy hullámhosszú részecskék „nem érzik” a potenciál apró részleteit [53, 54, 83]. Tehát az általunk használt Hamilton-operátor érvényességi kritériumai összefoglalva: $\lambda \gg d \gg a$, ahol λ a p és n tartománybeli de Broglie hullámhosszok nagyságrendjét jelöli. A használt kvantummechanikai modell érvényességi körének ismeretében természetesen adódik a kérdés, hogy milyen további feltételek teljesülése szükséges ahhoz, hogy az effektus – a magas részecskesűrűségű sávok kialakulása – minél erősebb, egy kísérletben minél jobban megfigyelhető legyen. Mivel a jelenség a geometriai optika Snellius-Descartes-törvényével interpretálható, ezért célszerű abban a paramétertartományban végrehajtani a mérést, ahol a geometriai optika érvényes: ehhez az $R \gg \lambda$ relációnak kell teljesülnie. Ez a feltétel garantálja (monoenergiás beeső nyaláb esetén) a jól elkülönülő kausztikák és az erős fókusz megjelenését. Megadható olyan realiztikus paraméterhalmaz, amely teljesíti mindezeket az elvárásokat. A mérések szerint ugyanis egy grafénbeli n - p átmenetben a potenciál nagyságrendileg egy $d \sim 10\text{nm}$ széles tartományon nő nulláról V_0 -ra [49]. Az $E = 40\text{meV}$, $V_0 = 80\text{meV}$ és $R = 800\text{nm}$ paraméterértékek esetén $n = -1$, és a fenti feltételek mindegyike teljesül, hiszen $\lambda = 100\text{nm}$.

További lényeges feltétel, hogy a beeső elektronnyaláb energiája jól definiált legyen, hiszen a törésmutató függ az energiától, tehát ha a beeső nyaláb energia szerinti eloszlását meghatározó (valós vagy effektív) hőmérséklet túl magas, az elmoshatja az éles kausztikákat és az éles fókuszt. Mivel az effektust a geometriai optika jól értelmezi, ezért nincs szükség arra, hogy a beeső elektronnyaláb koherens legyen – az optikai lencsék sem csak kohe-

rens fényyalábot tudnak fókuszálni. Egy kísérletben a legkönnyebben mérhető mennyiség a fókuszpont pozíciója, azaz az f fókusz távolság. A $p > 1$ húrokhoz tartozó kausztikák észlelése viszont kevésbé valószínű, lévén hogy az elektronsugár bizonyos hányada minden egyes belső reflexió során kilép a p tartományból, tehát a belső reflexiók számának növelésével a pályák intenzitása hatványszerűen lecsökken.

A jelenség észleléséhez szükséges továbbá, hogy a beeső elektronok párhuzamos nyalábot alkossanak. Ilyen párhuzamos nyaláb létrehozására alkalmas lehet egy „sima” p - n átmenet, ahol a p és n tartományok határa egy egyenes mentén húzódik, és az elektrosztatikus potenciál változására jellemző d hossz nagyobb a de Broglie hullámhossznál [54]. Egy ilyen speciális p - n átmenet ugyanis az elmélet szerint csak olyan elektronokat transzmittál, amelyek a határegyenesre merőlegesen érkeznek, azaz haladási irány szerint megszűri a beeső nyaláb részecskéit. Így tehát egy lehetséges kísérleti elrendezés az alábbi építőelemekből állhatna: egy forrásként szolgáló elektróda, egy „sima” p - n átmenet, a hengerszimmetrikus n - p átmenet és egy nyelőként szolgáló elektróda. A forrás és a nyelő közti feszültségkülönbség hatására kialakuló áram- vagy részecskesűrűség mérése pásztázó szondás mikroszkóppal megvalósítható [74, 75].

4.6. Összefoglalás

Ebben a fejezetben egyrétegű grafénben kialakuló kétdimenziós elektrongáz elektronállapotait vizsgáltuk kör alakú n - p átmenetben. A parciális hullámok módszerét használva demonstráltuk, hogy a kváziklasszikus limeszben, azaz ha az elektronok de Broglie hullámhossza jóval kisebb a p tartomány sugaránál, akkor a hullámfüggvények fő jellemzője az átmenet belsejében kialakuló, jól elkülönülő, magas részecskesűrűségű sávok kialakulása. Megmutattuk, hogy a sávok kialakulása a részecskék klasszikus dinamikájának következménye: az elektronpályák egy olyan Snellius-Descartes-törvénynek engedelmeskednek az n és p tartományokat elválasztó határon, amelyben a törésmutató negatív. Egzaktnul kiszámoltuk a p tartománybeli klasszikus pályák burkolójaként előálló kausztika egyenletét, és megmutattuk, hogy a kváziklasszikus limeszben a kvantummechanikai hullámfüggvény magas részecskesűrűségű sávjai és a kiszámolt görbe illeszkedik egymásra. Végül diszkutáltuk a vizsgált elektron-optikai rendszer megvalósíthatóságának kérdését is. Az eredmények alapján az eszköz a realisztikus paramétertartományban is működőképes.

5. fejezet

Függelék

5.1. Spinbillentő visszaszórás: a T -mátrix formalizmus

A 2. fejezetben beláttuk, hogy a

$$H = H_0 + V = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m^*} + V \quad (5.1)$$

Hamilton-operátor által definiált szórásproblémában nulla valószínűséggel fordul elő spinbillentő visszaszórás, ha a V szórópotenciál véges hatótávolságú és invariáns az időtükrözésre. A tétel egy az ottanival egyenértékű, ám talán szemléletesebb bizonyítását mutatjuk be ebben az alfejezetben, és ehhez az ún. T -mátrix formalizmust fogjuk használni. A levezetés lényegében az Ando és társai által a Dirac-egyenletre kidolgozott módszert [88] követi.

Először definiáljuk az ún. T -mátrix operátort a következőképpen [58, 88]:

$$T^+(E) := V \sum_{i=0}^{\infty} (G_0^+(E)V)^i, \quad (5.2)$$

ahol $G_0^+(E) := (E - H_0 + i\epsilon)^{-1}$ a rendszer retardált Green-operátora. Az E energiától való függést a továbbiakban expliciten nem jelöljük sem a Green-függvény, sem a T -mátrix esetében. Az S -mátrix formalizmussal való kapcsolatot az az itt nem bizonyított állítás alpozza meg, mely szerint a T -mátrix „mátrixelemei” és a (2.16) szórási amplitúdó között érvényes a következő arányosság [58]:

$$\langle \mathbf{k}'\sigma' | T^+ | \mathbf{k}\sigma \rangle := \phi_{\mathbf{k}',\sigma'}^\dagger T^+ \phi_{\mathbf{k},\sigma} \propto f_{\sigma'\sigma}(\varphi_{\mathbf{k}'}, \varphi_{\mathbf{k}}), \quad (5.3)$$

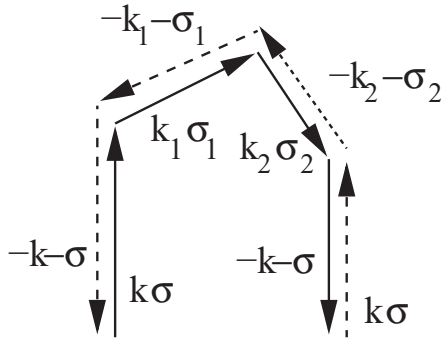
feltéve, hogy $k' = k$, és hogy az $\varepsilon_k := \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ energiához tartozó T -mátrixot és f szórási amplitúdót tekintjük.

Az előző állítás értelmében tehát feladatunk az, hogy belássuk: ha a V szórópotenciál invariáns az időtükrözésre, azaz $[V, i\sigma_y C] = 0$, akkor

$$\langle -\mathbf{k}, -\sigma | T^+ | \mathbf{k}, \sigma \rangle = 0. \quad (5.4)$$

Legyen j tetszőleges természetes szám. Ekkor

$$\begin{aligned} \langle -\mathbf{k}, -\sigma | V(G^+V)^j | \mathbf{k}, \sigma \rangle &= \sum_{\mathbf{k}_j, \sigma_j} \cdots \sum_{\mathbf{k}_1, \sigma_1} \langle -\mathbf{k}, -\sigma | V | \mathbf{k}_j, \sigma_j \rangle \cdots \langle \mathbf{k}_1, \sigma_1 | V | \mathbf{k}, \sigma \rangle \times \\ &\times [E - \varepsilon_{k_j} + i\epsilon]^{-1} \cdots [E - \varepsilon_{k_1} + i\epsilon]^{-1} \end{aligned} \quad (5.5)$$



5.1. ábra. Destruktívan interferáló szórási folyamatok időtükrözésre invariáns rendszerben. A folytonos vonallal jelzett pálya időtükrözöttje a szaggatott vonallal jelzett pálya.

Másrészt viszont éppen így igaz az is, hogy

$$\begin{aligned} \langle -\mathbf{k}, -\sigma | V(G^+V)^j | \mathbf{k}, \sigma \rangle &= \sum_{\mathbf{k}_j, \sigma_j} \cdots \sum_{\mathbf{k}_1, \sigma_1} \langle -\mathbf{k}, -\sigma | V | -\mathbf{k}_1, -\sigma_1 \rangle \cdots \langle -\mathbf{k}_j, -\sigma_j | V | \mathbf{k}, \sigma \rangle \times \\ &\times [E - \varepsilon_{k_j} + i\epsilon]^{-1} \cdots [E - \varepsilon_{k_1} + i\epsilon]^{-1} \end{aligned} \quad (5.6)$$

Az időtükrözési invariancia következménye, hogy $V = i\sigma_y C V (i\sigma_y C)^{-1}$, amiből adódik, hogy

$$\langle \mathbf{k}', \sigma' | V | \mathbf{k}, \sigma \rangle = \sigma' \sigma \langle -\mathbf{k}, -\sigma | V | -\mathbf{k}', -\sigma' \rangle. \quad (5.7)$$

Végül összeadva az (5.5) és az (5.6) egyenleteket, és kihasználva az imént kapott (5.7) összefüggést és az (5.2) definíciót, a bizonyítandó (5.4) állítás egyszerű számítással megkapható.

Hogy miért szemléletesebb ez a megközelítés, mint az S -mátrix formalizmus? Megpróbáljuk ezt az 5.1. ábrával megvilágítani. Az (5.5) összeg tagjai egy-egy pályával szemléltethetők. Az ábrán egy, a $j = 2$ esethez tartozó pályát és annak időtükrözöttjét rajzoltuk fel. A T -mátrix formalizmuson alapuló bizonyításunk során valójában azt használtuk fel, hogy ha V invariáns az időtükrözésre, akkor a T -mátrix kiszámolásakor bármely spinbillentő pálya járulékához hozzáadva a pálya időtükrözöttjének járulékát nullát kapunk. Ez okozza a spinbillentő visszaszórási folyamatok teljes hiányát az általunk vizsgált rendszerekben.

Irodalomjegyzék

- [1] T. Ando, A. B. Fowler and F. Stern. *Rev. Mod. Phys.* **54**, 437 (1982).
- [2] Sólyom Jenő. *A modern szilárdtestfizika alapjai I-III* (ELTE Eötvös Kiadó, 2002-2003).
- [3] C. W. J. Beenakker and H. van Houten. *Solid State Physics* **44** (1991).
- [4] Y. Imry. *Introduction to Mesoscopic Physics* (Oxford University Press, 1997).
- [5] G. Bastard. *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures* (John Wiley & Sons, 1991).
- [6] E. O. Kane. *J. Phys. Chem. Solids*. **1** (1956).
- [7] L. R. Ram-Mohan, K. H. Yoo and R. L. Aggarwal. *Phys. Rev. B* **38**, 6151 (1988).
- [8] Nagy Károly. *Kvantummechanika* (Nemzeti Tankönyvkiadó, 2000).
- [9] N. F. Mott and H. S. W. Massey. *The Theory of Atomic Collisions* (Oxford University Press, 1965).
- [10] R. Winkler. *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems* (Springer-Verlag, 2003).
- [11] R. Winkler. *Physica E* **22**, 450 (2004).
- [12] H.-E. Engel, E. I. Rashba and B. I. Halperin. *Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials*, volume 5 (John Wiley & Sons, 2007).
- [13] I. Vurgaftman, J. R. Meyer and L. R. Ram-Mohan. *J. Appl. Phys.* **89**, 5815 (2001).
- [14] J. Smit. *Physica (Utrecht)* **21**, 877 (1955).

- [15] J. Smit. *Physica (Utrecht)* **24**, 39 (1958).
- [16] P. Nozieres and C. Lewiner. *Journal de Physique* **34**, 901 (1973).
- [17] J. E. Hirsch. *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1834 (1999).
- [18] Y. K. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard and D. D. Awschalom. *Science* **306**, 1910 (2004).
- [19] V. Sih et al. *Nature Physics* **1**, 31 (2005).
- [20] H.-E. Engel, B. I. Halperin and E. I. Rashba. *Phys. Rev. Lett.* **95**, 166605 (2005).
- [21] E. I. Rashba. *Sov. Phys. Solid State* **2**, 1109 (1960).
- [22] J. Luo, H. Munekata, F. F. Fang and P. J. Stiles. *Phys. Rev. B* **38**, 10142 (1988).
- [23] J. Luo, H. Munekata, F. F. Fang and P. J. Stiles. *Phys. Rev. B* **41**, 7685 (1990).
- [24] G. Engels, J. Lange, T. Schäpers and H. Lüth. *Phys. Rev. B* **55**, 1958 (1997).
- [25] J. Nitta, T. Akazaki, H. Takayanagi and T. Enoki. *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1335 (1997).
- [26] D. Grundler. *Phys. Rev. Lett.* **84**, 6074 (2000).
- [27] T. Koga, Y. Sekine and J. Nitta. *Phys. Rev. B* **74**, 041302 (2006).
- [28] M. König et al. *Phys. Rev. Lett.* **96**, 076804 (2006).
- [29] G. Dresselhaus. *Phys. Rev.* **100**, 580 (1955).
- [30] S. D. Ganichev et al. *Nature* **417**, 153 (2002).
- [31] S. D. Ganichev et al. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 256601 (2004).
- [32] G. A. Khodaparast, R. E. Doezema, S. J. Chung, K. J. Goldammer and M. B. Santos. *Phys. Rev. B* **70**, 155322 (2004).
- [33] I. Zutic, J. Fabian and S. D. Sarma. *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323 (2004).
- [34] J. I. Ohe, M. Yamamoto, T. Ohtsuki and J. Nitta. *Phys. Rev. B* **72**, 041308 (2005).
- [35] T. Koga, J. Nitta, H. Takayanagi and S. Datta. *Phys. Rev. Lett.* **88**, 126601 (2002).

-
- [36] M. Governale, D. Boese, U. Zulicke and C. Schroll. Phys. Rev. B **65**, 140403 (2002).
- [37] O. Kálmán, P. Földi, M. G. Benedict and F. M. Peeters. arXiv:quant-ph/0612183v1 .
- [38] M. Khodas, A. Shekhter and A. M. Finkel'stein. Phys. Rev. Lett. **92**, 086602 (2004).
- [39] K. S. Novoselov et al. Proc. Natl. Acad. Sci. USA **201**, 10451 (2005).
- [40] K. S. Novoselov et al. Nature **438**, 197 (2005).
- [41] Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Stormer and P. Kim. Nature **438**, 201 (2005).
- [42] A. K. Geim and K. S. Novoselov. Nature Materials **6**, 183 (2007).
- [43] M. I. Katsnelson and K. S. Novoselov. Solid State Commun. **143**, 3 (2007).
- [44] C. W. J. Beenakker. arXiv:0710.3848v1 .
- [45] R. Saito, M. Fujita, G. Dresselhaus and M. S. Dresselhaus. Appl. Phys. Lett. **60**, 2204 (1992).
- [46] T. Ando. J. Phys. Soc. Jpn. **74**, 777 (2005).
- [47] D. P. DiVincenzo and E. J. Mele. Phys. Rev. B **29**, 1985 (1984).
- [48] M. Y. Han, B. Özyilmaz, Y. Zhang and P. Kim. Phys. Rev. Lett. **98**, 206805 (2007).
- [49] B. Huard et al. Phys. Rev. Lett. **98**, 236803 (2007).
- [50] B. Özyilmaz et al. Phys. Rev. Lett. **99**, 166804 (2007).
- [51] J. R. Williams, L. DiCarlo and C. M. Marcus. Science **317**, 638 (2007).
- [52] V. P. Gusynin and S. G. Sharapov. Phys. Rev. Lett. **95**, 146801 (2005).
- [53] V. V. Cheianov, V. I. Falko and B. L. Altshuler. Science **315**, 1252 (2007).
- [54] V. V. Cheianov and V. I. Falko. Phys. Rev. B **74**, 041403 (2006).
- [55] A. Pályi, C. Péterfalvi and J. Cserti. Phys. Rev. B **74**, 073305 (2006).
- [56] M. Abramowitz and I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York, 1972).

- [57] L. Diósi. *A Short Course in Quantum Information Theory* (Springer, 2007).
- [58] L. E. Ballentine. *Quantum Mechanics* (World Scientific, 1998).
- [59] H. C. Huang, O. Voskoboynikov and C. P. Lee. Phys. Rev. B **67**, 195337 (2003).
- [60] F. E. Meijer, A. F. Morpurgo and T. M. Klapwijk. Phys. Rev. B **66**, 033107 (2002).
- [61] L. Hu, Z. Huang and S. Hu. Phys. Rev. B **73**, 235314 (2006).
- [62] S. Y. Liu, N. J. M. Horing and X. L. Lei. Phys. Rev. B **74**, 165316 (2006).
- [63] W.-K. Tse and S. D. Sarma. Phys. Rev. B **74**, 245309 (2006).
- [64] S. Y. Liu, N. J. M. Horing and X. L. Lei. Phys. Rev. B **76**, 195309 (2007).
- [65] A. Csordás, J. Cserti, A. Pályi and U. Zülicke. Eur. Phys. J. B **54**, 189 (2006).
- [66] M. Valín-Rodríguez, A. Puente and L. Serra. Phys. Rev. B **69**, 153308 (2004).
- [67] I. Vurgaftman and J. R. Meyer. Phys. Rev. B **70**, 205319 (2004).
- [68] D. Sánchez and L. Serra. Phys. Rev. B **74**, 153313 (2006).
- [69] L. Serra and D. Sánchez. J. Phys.: Conf. Ser. **61**, 1037 (2007).
- [70] R. López, D. Sánchez and L. Serra. Phys. Rev. B **76**, 035307 (2007).
- [71] A. Pályi and J. Cserti. Phys. Rev. B **76**, 035331 (2007).
- [72] J. Y. Yeh, M.-C. Chang and C.-Y. Mou. Phys. Rev. B **73**, 035313 (2006).
- [73] J. D. Walls, J. Huang, R. M. Westervelt and E. J. Heller. Phys. Rev. B **73**, 035325 (2006).
- [74] M. A. Topinka et al. Science **289**, 2323 (2000).
- [75] M. A. Topinka et al. Nature **410**, 183 (2001).
- [76] R. Landauer. IBM J. Res. Develop. **1**, 223 (1957).
- [77] W. Zwerger, L. Bonig and K. Schonhammer. Phys. Rev. B **43**, 6434 (1991).
- [78] A. G. Mal'shukov and C. S. Chu. Phys. Rev. Lett. **97**, 076601 (2006).

-
- [79] S. LaShell, B. A. McDougall and E. Jensen. Phys. Rev. Lett. **77**, 3419 (1996).
 - [80] G. Nicolay, F. Reinert, S. Hufner and P. Blaha. Phys. Rev. B **65**, 033407 (2001).
 - [81] J. Henk, A. Ernst and P. Bruno. Phys. Rev. B **68**, 165416 (2003).
 - [82] C. R. Ast et al. Phys. Rev. B **75**, 201401 (2007).
 - [83] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov and A. K. Geim. Nature Physics **2**, 620 (2006).
 - [84] J. Cserti, A. Pályi and C. Péterfalvi. Phys. Rev. Lett. **99**, 246801 (2007).
 - [85] D. S. Novikov. Phys. Rev. B **76**, 245435 (2007).
 - [86] P. Vodo, P. V. Parimi, W. T. Lu and S. Sridhar. Appl. Phys. Lett. **86**, 201108 (2005).
 - [87] T. Ando and T. Nakanishi. J. Phys. Soc. Jap. **67**, 1704 (1998).
 - [88] T. Ando, T. Nakanishi and R. Saito. J. Phys. Soc. Jap. **67**, 2857 (1998).

András Pályi

Spin-dependent scattering processes in two-dimensional electron systems

Summary of the PhD thesis

In my thesis I have studied the theory of elastic spin-dependent scattering processes in two-dimensional electron systems. Three different types of two-dimensional electron gases have been considered: symmetric quantum wells, asymmetric quantum wells with the so-called Rashba spin-orbit coupling, and monolayer graphite (graphene).

Regarding symmetric quantum wells, I have derived a two-dimensional model Hamiltonian describing the spin-orbit field of charged impurities close to the electron gas. I have derived the symmetry relations of the differential scattering cross section and the asymptotic polarization corresponding to the spin-dependent scattering process on such scattering potentials. My results show that the dimension reduction results in essential deviations compared to the three-dimensional scattering on atomic spin-orbit potentials (the so-called Mott scattering).

I have generalized the S -matrix scattering formalism and the symmetry analysis of the quantities describing the scattering process for two-dimensional electron systems in asymmetric quantum wells, taking into account the Rashba spin-orbit interaction. As an application of the formalism and the symmetry relations, I have calculated the nonequilibrium spin-distribution around an isolated impurity when a weak dc current is flowing through the system.

The S -matrix scattering formalism developed for the Rashba system is well applicable for the continuum model of the electron gas in graphene because of the structural similarity of the effective Hamiltonians describing these systems. In graphene, electron dynamics in the vicinity of an n - p junction can be described by Snell's law with negative refraction index. In the thesis I have calculated exact electron wavefunctions in abrupt cylindrical graphene n - p junctions using the scattering formalism, and shown that in a certain range of parameters the quantum dynamics of the electrons can be interpreted by concepts of geometrical optics.

Pályi András

Spinfüggő szórási folyamatok kétdimenziós elektronrendszerekben

A doktori értekezés összefoglalása

Doktori értekezésemben kétdimenziós elektronrendszerekben lejátszódó rugalmas és spinfüggő szórási folyamatok elméletével foglalkoztam. Három különböző rendszert vizsgáltam: szimmetrikus kvantumödrök elektronrendszerét, aszimmetrikus kvantumödrökben kialakuló elektrongáz a Rasba-féle spin-pálya kölcsönhatás jelenlétében, és az egyrétegű grafit (grafén) elektronjainak rendszerét.

A szimmetrikus kvantumödrök vizsgálata során kiszámoltam, hogy az elektrongáz környezetében található töltött szennyezők által keltett spin-pálya-potenciál milyen alakban jelenik meg az elektrongáz dinamikáját meghatározó kétdimenziós effektív Hamilton-operátorban. Levezettem, hogy az így kapott modellben milyen szimmetriarelációk jellemzik a szennyezőkön való spinfüggő szórási folyamatot leíró fizikai mennyiségeket: a differenciális hatáskeresztmetszetet és az aszimptotikus polarizációt. A kétdimenziós modellből kapott eredmények lényeges eltéréseket mutatnak ahhoz az esethez képest, amikor három dimenzióban mozgó elektronok szóródnak atomi spin-pálya potenciálon (Mott-szórás).

Általánosítottam az S -mátrix formalizmust és a fent említett szimmetria-analízist aszimmetrikus kvantumödrökben létrehozott kétdimenziós elektronrendszerek esetére, figyelembe véve az ezekre a rendszerekre jellemző Rasba-féle spin-pálya kölcsönhatást is. A formalizmus és az ebből származtatott szimmetriarelációk alkalmazásaképpen kiszámoltam, hogy milyen nemegyensúlyi spin-eloszlás jön létre egy izolált szennyező környezetében, ha a rendszeren gyenge egyenáram folyik keresztül.

A Rasba-rendszer esetén használt S -mátrix formalizmus jól használható a grafén elektronrendszerének kontinuum modelljében is, mert a két rendszer effektív Hamilton-operátorának szerkezete hasonló. Grafénben létrehozott n - p átmenetek közelében az elektronok mozgása leírható egy olyan Snellius-Descartes-törvénnyel, melyben a törésmutató negatív. Dolgozatomban a szórásprobléma formalizmusát használva kiszámoltam az elektronok egzakt hullámfüggvényét hengerszimmetrikus n - p átmenetekben, és megmutattam, hogy egy bizonyos paramétertartományban a kvantumos dinamika megérthető a geometriai optika eszközeivel.